Kristallwachstum nahe dem Roughening-Phasenübergang im sine-Gordon Modell

INAUGURAL - DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Bernhard Neudecker

aus Bonn

Düsseldorf 1982

Kristallwachstum nahe dem Roughening-Phasenübergang im sine-Gordon Modell

INAUGURAL - DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Bernhard Neudecker

aus Bonn

Düsseldorf 1982

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Für Barbara

Inhaltsverzeichnis

		Seite
1.	Einleitung	1
2.	Das Modell	4
	2.1 Definition	4
	2.2 Universalitätsklasse	4
	2.3 Symmetrie	5
3.	Statik	7
	3.1 Amit-Goldschmidt-Grinstein-Theorie	7
	3.2 Erweiterung auf $d = 2 - \epsilon$ Dimensionen	7
4.	Dynamik	11
	4.1 Renormierung und Renormierungsgruppengleichung	11
	4.2 Skalenverhalten und kritische Exponenten in $d = 2 - \epsilon$ Dimensionen	13
5.	Bewegungsgleichung in d=2 Dimensionen	15
	5.1 Mean-Field Theorie	15
	5.2 Monte-Carlo Simulation	16
	5.3 Linear-Response Theorie	18
	5.4 Dynamische Renormierungsgruppentheorie	19
6.	Diskussion	25
	Anhang	26
	Abbildungen	47
	Literaturverzeichnis	54

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41535714_0083

1. Einleitung

In dieser Arbeit wird eine dynamische Renormierungsgruppentheorie des sine-Gordon-Modells [1] vorgeschlagen. Dieses ursprünglich der Elementarteilchenphysik entstammende Modell hat in den letzten Jahren auch in der statistischen Physik zunehmend an Bedeutung gewonnen.Das liegt zum einen am Strukturreichtum des Modells, mit dem nicht nur die Dynamik des Kristallwachstums in der Umgebung des Roughening-Übergangs [2]modelliert werden kann, sondern so unterschiedliche Phänomene wie Dynamik der Kristallversetzungen, Dynamik der Blochwände in Ferromagneten, Ausbreitung des magnetischen Flusses in Josephson-Übergängen, selbstinduzierte Transparenz oder anharmonische Gittermodelle, um nur einige Anwendungen zu nennen, lassen sich mit diesem Modell studieren. Dabei spielt vor allem die sine-Gordon Gleichung

$$\phi_{xx} - \phi_{tt} = \sin\phi$$

als strukturreichste solitonentragende Evolutionsgleichung eine große Rolle.

Darüber hinaus gewann das sine-Gordon Modell in den letzten Jahren eine gewisse Bedeutung im Zusammenhang mit grundlegenden Fragen der Theorie der Phasenübergänge. Die Zustandssumme eines neutralen zweidimensionalen Coulomb-Gases zum Beispiel, bestehend aus positiven und negativen Einheitsladungen, kann mittels einer Dualitätstransformation auf diejenige des sine-Gordon Modells abgebildet werden [3]. Vernachlässigt man höhere Vortex - Antivortex Anregungen, so gehört auch das vieldiskutierte XY-Modell in diese Modellklasse. Der in diesem Modell auftretende Phasenübergang ist vom Kosterlitz-Thouless Typ [4]und ist wegen seiner ungewöhnlichen kritischen Eigenschaften lange Zeit nicht verstanden worden.

Das in der vorliegenden Arbeit untersuchte dynamische sine-Gordon Modell wurde von Chui und Weeks [2] zur Untersuchung der Dynamik des Roughening-Übergangs, also des Übergangs von einer lokalisierten (glatten) zu einer delokalisierten (rauhen) Grenzfläche in einem dreidimensionalen Gittergas- (Ising-) Modell,

vorgeschlagen. In der Natur ist dieser Übergang an der Grenzfläch zwischen kristalliner und flüssiger bzw. gasförmiger Phase eines Stoffes zu erwarten. Inzwischen gibt es vermehrt Anstrengungen, diesen Übergang im Experiment zu beobachten. Die meisten Experimente werden bisher mit Helium durchgeführt [5]. Neben technischen Schwierigkeiten bei der Durchführung der Experimente gibt es eine Reihe theoretischer Gründe, weshalb es äußerst schwierig sein dürfte, den Roughening-Übergang direkt zu beobachten.

Zum einen ergibt sich für endliche Proben, daß die effektive "Rauhigkeit" der Oberfläche nur extrem schwach, nämlich mit dem Logarithmus des Probendurchmessers, divergiert [2]. Weiterhin wirkt sich die Anwesenheit eines Gravitationspotentials störend aus. Einfache Abschätzungen [6] für Helium ergeben, daß das Gravitationsfeld der Erde alle Fluktuationen mit Wellenlängen, die größer sind als etwa 1 cm, beschränkt. Schließlich ist wegen des großen Bereichs der thermischen Aktivierung der kritische Bereich beim Roughening nur innerhalb ca. 3% um T_R zu beobachten [7]. Dies entspricht einer Korrelationslänge von mindestens 10^6 Gitterkonstanten. Damit bleiben zwischen 10^6 und 10^8 (= 1 cm) Gitterkonstanten nur 2 Größenordnungen als "kritischer Bereich".

Es ist daher von großer Bedeutung, solche physikalischen Größen zu untersuchen, deren Verhalten sich am Roughening-Übergan ganz empfindlich verändert. Neben der Korrelationslänge sollte sich die Kristallwachstumsrate in der Umgebung des Übergangs qualitativ drastisch verändern. Es ist nicht schwer vorstellbar, daß die für das Kristallwachstum entscheidenden Prozesse wie Kondensation und Verdampfen von Atomen an der Oberfläche oder Umlagerungen innerhalb der Oberfläche sich qualitativ an glatten Oberflächen völlig anders abspielen als an rauhen Oberflächen. Ergebnisse von Computer-Simulationen, auf die ich später noch etwas ausführlicher zu sprechen komme, weisen eindeutig in diese Richtung.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt angelegt. Zunächst werden in Kapitel 2 die grundlegenden Definitionen für das betrachtete

Modell vorgestellt, seine Verwandtschaft mit anderen Modellen erwähnt (Universalitätsklasse) sowie auf die in diesem Modell vorliegende Symmetrie hingewiesen. Kapitel 3 faßt zunächst kurz die wichtigsten Ergebnisse der für die Renormierung des Modells grundlegenden Theorie von Amit, Goldschmidt und Grinstein zusammen und gibt eine Erweiterung auf $d = 2 - \epsilon$ Dimensionen an. In Kapitel 4 wende ich mich der Renormierung des dynamischen Modells zu und untersuche Skalenverhalten und kritische Exponenten des dynamischen Strukturfaktors in $d = 2 - \epsilon$ ($0 \leq \epsilon << 1$) Dimensionen. Kapitel 5 ist schließlich der Anwendung des Modells auf das Problem des Kristallwachstums in der Umgebung des Roughening-Übergangs gewidmet. Zunächst werden kurz die wichtigsten bisher bekannten Methoden und Theorien vorgestellt, um dann die Ergebnisse der von mir [8] vorgeschlagenen dynamischen Renormierungsgruppentheorie zu erläutern.

Der an Details der Rechnungen interessierte Leser findet im Anhang eine Darstellung der Grundzüge der Störungsrechnung für das sine-Gordon Modell.

2. Das Modell

2.1 Definition

Dieser Arbeit liegt ein von Chui und Weeks [2] vorgeschlagenes Modell zur Beschreibung der Dynamik der Grenzfläche zwischen kristalliner und gasförmiger Phase einer Substanz in der Umgebung des Roughening-Übergangs zugrunde. Das Modell wird definiert durch die Langevin-Gleichung

$$\partial_t S = -\gamma \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta S} + \zeta \tag{2.1}$$

mit der sine-Gordon "Hamiltonfunktion"

$$\mathcal{H} = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla S)^2 - \frac{\alpha}{a^2 \beta^2} \cos \beta S \right\} \tag{2.2}$$

und dem Onsager-Koeffizienten γ. $S(xt)$ beschreibt ein klassisches Skalarfeld in d Raumdimensionen, $\zeta(xt)$ ist eine gaussverteilte Langevinkraft mit weißem Rauschspektrum.

Der Erwartungswert der Zufallsvariablen $S(xt)$ beschreibt für d=2 die Höhenkoordinate der Grenzschicht bezüglich einer Referenzebene. Der dimensionslose Parameter β^2 ist proportional zur Temperatur, α ist die (dimensionslose) Kopplungskonstante des sine-Gordon Feldes. Das Modell besitzt einen intrinsischen ultraviolett cut-off $\Lambda = a^{-1}$ (a ist die Gitterkonstante der kristallinen Phase).

2.2 Universalitätsklasse

Das durch (2.2) definierte (statische) sine-Gordon Modell (d=2) liegt in der Universalitätsklasse des XY-Modells. Das erkennt man unmittelbar an der von Samuel [3] untersuchten Abbildung auf ein zweidimensionales neutrales Coulomb-Gas, von dem Kosterlitz und Thouless zeigten, daß es in der Universalitätsklasse des XY-Modells liegt. Der in dieser Klasse auftretende Phasenübergang weist einige Besonderheiten auf. So zeigt beispielsweise die freie Energie am kritischen Punkt eine wesentliche Singularität der Form $\exp\{-A|T-T_R|^{-\frac{1}{2}}\}$ (A ist eine Konstante)

auf, so daß alle Ableitungen der freien Energie nach der Temperatur stetig sind. Trägt man etwa die spezifische Wärme gegen die Temperatur auf, so ergibt sich kein Anhaltspunkt für einen Phasenübergang bei T_R. In diesem Sinne spricht man von einem Phasenübergang unendlicher Ordnung.

Die fundamentale Idee, die dem durch (2.1) definierten stochastischen Prozeß zugrunde liegt, ist die Hypothese der dynamischen Universalität [9]. Diese besagt, daß zusätzlich zu den statisch relevanten Beiträgen nur (hydrodynamische) Erhaltungssätze und Kopplungen zwischen erhaltenen Größen zu berücksichtigen sind.

Das vorliegende Modell ist besonders einfach, da keine Erhaltungsgrößen wie Energie- oder Impulsdichte betrachtet werden müssen [2]. Die zugrunde liegende kinetische Gleichung in Form einer rein relaxierenden Langevin-Gleichung (Modell A in der Terminologie von Halperin und Hohenberg) liefert somit Informationen über alle Systeme, die dieser Universalitätsklasse angehören.

2.3 Symmetrie

Das vorliegende Modell ist invariant unter der diskreten Translation

$$s(x,t) \longrightarrow s'(x,t) = s(x,t) + \frac{2\pi}{\beta} \qquad (2.3)$$

Dies hat zur Folge, daß der Grundzustand abzählbar unendlichfach entartet ist. Dies wirft für die mathematische Behandlung des Modells ernsthafte Schwierigkeiten (sogenannte "Infrarotprobleme") auf.

Ich folge dem Vorschlag von Amit, Goldschmidt und Grinstein [10] und füge als symmetriebrechendes Feld den "Massenterm"

$$\int d^d x \;\; \frac{1}{2}\, m^2 s^2 \qquad (2.4)$$

zur Hamiltonfunktion (2.2) hinzu.

Amit et al. wiesen darauf hin, daß der Massenterm am Kosterlitz-Thouless Fixpunkt der Renormierungsgruppe eine relevante Störung darstellt und daher "soft" behandelt werden kann.

Ferner zeigte der Autor [11] (siehe Anhang A), daß der Massenterm die Symmetrie (2.3) nur "schwach" bricht in dem Sinne, daß der nichtgaussische Teil der freien Energie (Vertexerzeugendes Funktional) nach wie vor die diskrete Translationsinvarianz (2.3) aufweist.

Als Konsequenz daraus folgt [11] (siehe Anhang B), daß der Massenterm nicht Anlaß zu einer neuen (nichttrivialen) Renormierungskonstanten gibt.

3. Statik

3.1 Amit-Goldschmidt- Grinstein-Theorie

Das Problem der Renormierung des sine-Gordon Modells wurde zunächst von Coleman [1] untersucht. Weitere wichtige Beiträge stammen von Minnhagen et al.[12], Samuel [3], Banks et al.[14], Schroer et al.[15] und Wiegmann [16]. Ein gewisser Durchbruch wurde erzielt mit der Arbeit von Amit, Goldschmidt und Grinstein [10], deren wesentlichste Ergebnisse kurz zusammengestellt seien:

a) Das sine-Gordon Modell ist in d=2 renormierbar für $\beta^2 = 8\pi$, nicht renormierbar für $\beta^2 > 8\pi$, superrenormierbar für $\beta^2 < 8\pi$.

b) Die Störung $\cos\beta s$ ist am Kosterlitz-Thouless Fixpunkt marginal.

c) Neben der Renormierung der Kopplungskonstanten [1] reicht eine Wellenfunktionsrenormierung aus, um den Zweipunktvertex zu renormieren, und zwar Ordnung für Ordnung in einer Doppelentwicklung nach der Kopplungskonstanten α und der Abweichung $\delta = \frac{1}{8\pi}\beta^2 - 1$ vom Kosterlitz-Thouless Fixpunkt.

d) Höhere Harmonische der Form $\cos p\beta s$; $p \geq 2$ sind am Kosterlitz-Thouless Fixpunkt irrelevant.

3.2 Erweiterung auf $d = 2 - \epsilon$ Dimensionen [17]

Der Beweis der Renormierbarkeit des sine-Gordon Modells in der Nähe von 2 Dimensionen steht bisher aus. Ich stelle in diesem Kapitel die Behauptung auf, das Modell sei renormierbar Ordnung für Ordnung in einer Dreifachentwicklung nach α, δ und $\epsilon = 2 - d$. Dabei ist δ die Abweichung der reduzierten (dimensionslosen) Temperatur von ihrem Wert am Kosterlitz-Thouless Fixpunkt. Es erweist sich im Hinblick auf die Fixpunktstruktur der Renormierungsgruppe und damit das kritische Verhalten des Modells als zweckmäßig, die Entwicklungsparameter α^2, δ und ϵ als klein von gleicher Ordnung anzusehen.

Zur Bestimmung der Trajektoren für Temperatur und Kopplungskonstante untersuche ich die Renormierung des Zweipunktvertex $\Gamma^{(2)}$. Im Folgenden dient der Index Null zur Unterscheidung ursprünglicher (nackter) Größen von renormierten Größen (ohne Index). Störungsrechnung 3. Ordnung ergibt (Details entnehme man dem Anhang)

$$\Gamma_0^{(2)}(q,\alpha_0,\beta_0,m_0^2,a) = \tag{3.1}$$

$$= q^2 + m_0^2 + \alpha_0 J - (\alpha_0 J)^2 \beta_0^{-2} \int d^dx \left\{ e^{-iqx} Q(x) - P(x) \right\}$$
$$+ (\alpha_0 J)^3 \beta_0^{-4} \int d^dx\, d^dy \left\{ e^{-iqx} Q(x)\, e^{-iqy} Q(y) \right.$$
$$- 2 e^{-iqx} Q(x) P(y) - e^{-iqx} S(x) P(y) P(x-y)$$
$$+ e^{-iqx} P(x) S(y) S(x-y) + P(x) P(x-y) + \tfrac{1}{2} P(x) P(y)$$
$$\left. + \tfrac{1}{2} P(x) P(y) P(x-y) - \tfrac{1}{2} S(x) S(y) S(x-y) \right\} + O(\alpha_0^4)$$

mit den Abkürzungen

$$I(x) = \beta_0^2 G(x,a); \quad J = a^{-2} e^{-\frac{1}{2} I(0)} \tag{3.2}$$
$$S(x) = \sinh I(x) \; ; \quad Q(x) = S(x) - I(x)$$
$$P(x) = \cosh I(x) - 1$$

Der Propagator $G(x,a)$ ist ultraviolett regularisiert. Die Regularisierung von Amit et al.

$$G(x,a) = \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \frac{e^{iqy}}{q^2+m_0^2} \Big|_{y^2 = x^2+a^2} \tag{3.3}$$
$$= (2\pi a m_0^{-1})^{\frac{\varepsilon}{2}} \frac{1}{2\pi} K_{\frac{\varepsilon}{2}} \left[m_0 (x^2+a^2)^{\frac{1}{2}} \right]$$

hat sich als zweckmäßig erwiesen. $K_\nu(z)$ ist die modifizierte Besselfunktion der Ordnung ν, deren asymptotisches Verhalten für $\alpha < \nu, z \ll 1$ gegeben ist durch [18]

$$K_\nu(z) \longrightarrow -\tfrac{1}{2} \ln c z^2 \tag{3.4}$$

($c = \frac{1}{4} e^{2\gamma_1}$, γ_1 ist Eulers Konstante)

In $\Gamma_0^{(2)}$ treten für $\beta_0^2 = 8\pi$, $\epsilon = 0$ logarithmische Divergenzen auf. Ich behaupte, daß sie durch zwei unabhängige Renormierungskonstanten Z und Z_α absorbiert werden können. Dazu definiere ich renormierte Parameter α , $\beta^2 = \varkappa^\epsilon \tau^2$ und m, sowie das renormierte Feld $s(x)$ gemäß

$$\begin{aligned} s_0^2(x) &= Z\, s^2(x) \quad ; \quad \beta_0^2 = Z^{-1}\beta^2 = a^{-\epsilon}\tau_0^2 \\ \alpha_0 &= Z_\alpha\, \alpha \quad ; \quad m_0^2 = Z^{-1} m^2 \end{aligned} \tag{3.5}$$

und behaupte, Z und Z_α können als Funktionen von a so gewählt werden, daß der Limes $a \to 0$ des renormierten Zweipunktvertex

$$\begin{aligned} &\Gamma^{(2)}\left(q, \alpha, \delta = \tfrac{\tau^2}{8\pi} - 1, m^2, \epsilon, \varkappa, a\right) \\ &= Z\, \Gamma_0^{(2)}\left(q, \alpha_0, \delta_0 = \tfrac{\tau_0^2}{8\pi} - 1, m_0^2, \epsilon, a\right) \end{aligned} \tag{3.6}$$

existiert, und zwar Ordnung für Ordnung in einer Dreifachentwicklung nach α , δ und ϵ . Hierbei ist $\varkappa$ ein (inverser) Längenmaßstab zur Definition der renormierten Theorie. Es ist zweckmäßig, Z und Z_α durch minimale Subtraktion der logarithmischen Singularitäten so zu bestimmen, daß die Koeffizienten von q^2 und m^2 in $\Gamma^{(2)}$ endlich sind.

Das Resultat in dritter Ordnung Störungsrechnung ist

$$\begin{aligned} Z &= 1 + \alpha^2 \tfrac{1}{64} \ln \varkappa^2 a^2 + O(\alpha^4) \\ Z_\alpha &= 1 - \delta \ln \varkappa^2 a^2 + \alpha^2 \tfrac{1}{128}\left[\ln^2 \varkappa^2 a^2 - 5 \ln \varkappa^2 a^2\right] \\ &\quad - \epsilon \tfrac{1}{4}\left[\ln^2 \varkappa^2 a^2 + (\ln 4\pi^2 c)\, \ln \varkappa^2 a^2\right] + O(\alpha^4) \end{aligned} \tag{3.7}$$

Für $\Gamma^{(2)}$ gilt die Renormierungsgruppengleichung

$$\left(\varkappa \partial_\varkappa + \beta_\alpha \partial_\alpha + \beta_\delta \partial_\delta + m^2 \zeta_m \partial_{m^2} + \zeta\right)\Gamma^{(2)}\left(q, \alpha, \delta, m^2, \epsilon, \varkappa\right) = 0 \tag{3.8}$$

mit

$$\begin{aligned} \beta_\alpha &= (\varkappa \partial_\varkappa \alpha)_b = \alpha\left(2\delta + \epsilon \ln 2\pi c^{\frac{1}{2}} + \tfrac{5}{64}\alpha^2\right) + O(\alpha^4) \\ \beta_\delta &= (\varkappa \partial_\varkappa \delta)_b = -\epsilon + \tfrac{1}{32}\alpha^2 + O(\alpha^4) \\ \zeta_m &= (\varkappa \partial_\varkappa \ln m^2)_b = \tfrac{1}{32}\alpha^2 + O(\alpha^4) \\ \zeta &= (\varkappa \partial_\varkappa \ln Z^{-1})_b = -\tfrac{1}{32}\alpha^2 + O(\alpha^4) \end{aligned} \tag{3.9}$$

Der Index b bedeutet Differentiation bei festgehaltenen unrenormierten Größen.

Für die Parameter α und δ erhält man in 3. Ordnung die Flow-Gleichungen

$$\begin{aligned} \ell\,\partial_\ell\,\bar{\alpha}(\ell) &= \bar{\alpha}(\ell)\left[2\,\bar{\delta}(\ell) + \epsilon\,\ln 2\pi c^{\frac{1}{2}} + \frac{5}{64}\,\bar{\alpha}^2(\ell)\right] \\ \ell\,\partial_\ell\,\bar{\delta}(\ell) &= -\epsilon + \frac{1}{32}\,\bar{\alpha}^2(\ell) \end{aligned} \tag{3.10}$$

Bis auf nichtuniverselle Konstanten stimmen die Gleichungen (3.10) mit dem von Kosterlitz [19] gefundenen Flow für das $2-\epsilon$ -dimensionale Coulombgas überein. Die Abbildungen 1 - 3 zeigen den zugehörigen Trajektorenverlauf für $\epsilon>0$, $\epsilon=0$ und $\epsilon<0$. Für $\epsilon<0$ besitzt das Modell nur eine Tieftemperaturphase [19]. Dies entspricht einer glatten, lokalisierten Grenzfläche.

Unterhalb von d=2 Dimensionen ($\epsilon>0$) besitzt das Modell eine Tief- und eine Hochtemperaturphase. Zu festem $\alpha>0$ gibt es eine kritische Temperatur $\delta_c(\alpha)$ derart, daß unter der Renormierungsgruppentransformation das Modell in den kritischen Fixpunkt

$$\alpha_* = (32\epsilon)^{\frac{1}{2}} \quad ; \quad \delta_* = -\frac{1}{4}\,\epsilon\,(5 + \ln 4\pi^2 c) \tag{3.11}$$

abgebildet wird. Für $\delta \gtrless \delta_c(\alpha)$ ist die Korrelationslänge endlich. Sie divergiert für $\delta \to \delta_c$ gemäß ($m = 0$)

$$\xi \sim |\delta - \delta_c|^{-\nu} \tag{3.12}$$

mit dem kritischen Exponenten [19, 35]

$$\nu^{-1} = 2\epsilon^{\frac{1}{2}} + O(\epsilon) \tag{3.13}$$

Für den kritischen Exponenten η der Korrelationsfunktion (vgl [21]) finde ich

$$\eta = \epsilon + \dots \tag{3.14}$$

4. Dynamik

4.1 Renormierung und Renormierungsgruppengleichung

Alle Korrelations- und Responsefunktionen des in Kapitel 2.1 definierten dynamischen Modells lassen sich aus dem erzeugenden Funktional [22,23]

$$Z[\tilde{H},H] = \int d[i\tilde{s},s]\, \exp\left\{ J[\tilde{s},s] + (\tilde{H},\tilde{s}) + (H,s) \right\} \qquad (4.1)$$

mit dem Wirkungsfunktional

$$J[\tilde{s},s] = \int d^dx\, dt \left\{ \gamma\tilde{s}^2 - \tilde{s}\left[\partial_t s + \gamma \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta s}\right]\right\} \qquad (4.2)$$

berechnen. Das Feld $\tilde{s}(xt)$ ist dabei ein von Martin-Siggia-Rose eingeführtes Responsefeld [24]. Der gaussische (quadratische) Teil des Wirkungsfunktionals hat die Gestalt ($\underline{\underline{s}} = (\tilde{s}, s)$)

$$J_G[\underline{\underline{s}}] = -\tfrac{1}{2}\,(\underline{\underline{s}}, \underline{\underline{K}}\,\underline{\underline{s}}) \qquad (4.3)$$

mit dem Integralkern

$$\underline{\underline{K}}(xt,x't') = \begin{pmatrix} -2\gamma & ; & \partial_t - \gamma\Delta \\ -\partial_t - \gamma\Delta & ; & 0 \end{pmatrix} \delta(x-x')\,\delta(t-t') \qquad (4.4)$$

(Ich verwende die in [8] eingeführte Notation.)

Daraus folgt für den ultraviolett und infrarot regularisierten Korrelationspropagator [25]

$$G^{22}(xt) = \int_q (q^2+m^2)^{-1} \exp\left\{ iqy - \gamma(q^2+m^2)|t| \right\}\Big|_{y^2=x^2+a^2} \qquad (4.5)$$

Zur Bestimmung der Trajektorien für den Onsager-Koeffizienten betrachte ich die Renormierung des Zweipunktvertex $\Gamma^{12}_{q\omega}$ [8]. Wieder dient der Index Null zur Unterscheidung ursprünglicher (nackter) Größen von renormierten Größen (ohne Index). In $\Gamma^{12}_{0\,q\omega}$ treten für $\beta_0^2 = 8\pi$, $\epsilon \to 0$ logarithmische Divergenzen auf. Ich behaupte, daß sie durch drei unabhängige Renormierungskonstanten Z, $\tilde{Z}$ und Z_α absorbiert werden können. Dazu definiere ich renormierte Parameter α, $\beta^2 = \pi^\epsilon \tau^2$, γ und m, sowie renormierte Felder $s(xt)$ und $\tilde{s}(xt)$ gemäß

$$s_0^2(xt) = Z\, s^2(xt)\,; \quad \tilde{s}_0^2(xt) = Z^{-1}\tilde{Z}^2\,\tilde{s}^2(xt) \qquad (4.6)$$

$$\alpha_0 = Z_\alpha\,\alpha\,; \quad \beta_0^2 = Z^{-1}\beta^2 = a^{-\epsilon}\tau_0^2$$

$$\gamma_0 = Z\tilde{Z}^{-1}\gamma\,; \quad m_0^2 = Z^{-1}m^2$$

und behaupte, $\mathcal{Z}$, $\tilde{\mathcal{Z}}$ und $\mathcal{Z}_\alpha$ können als Funktionen von a so gewählt werden, daß der renormierte Zweipunktvertex

$$\Gamma^{12}_{q\omega}\left(\alpha, \delta = \frac{\tau^2}{8\pi} - 1, \gamma, m^2, \epsilon, \varkappa, a\right) = \tag{4.7}$$
$$= \tilde{\mathcal{Z}}\, \Gamma^{12}_{0\, q\omega}\left(\alpha_0, \delta_0 = \frac{\tau_0^2}{8\pi} - 1, \gamma_0, m_0^2, \epsilon, a\right)$$

im Limes a→0 endlich wird, und zwar Ordnung für Ordnung in einer Dreifachentwicklung nach α, δ und ϵ.

Aus

$$\Gamma^{12}_{0\, q, \omega=0} = \gamma_0\, \Gamma^{(2)}_{0\, q} \tag{4.8}$$

folgt, daß $\mathcal{Z}$ und $\mathcal{Z}_\alpha$ in (4.6) mit den in Kapitel 3 bestimmten statischen Größen übereinstimmen.

Aus dem Dissipations-Fluktuationstheorem [25] folgt, daß der Onsager-Koeffizient γ keine (nichttriviale) Renormierung erfordert. Es ist somit nur eine intrinsisch dynamische Renormierungskonstante $\tilde{\mathcal{Z}}$ zu bestimmen.

Die Transformation

$$S(xt) \longrightarrow S'(xt) = S(xt) + \frac{\pi}{\beta}\ ;\ \alpha \longrightarrow \alpha' = -\alpha \tag{4.9}$$

läßt das $\mathcal{T}$-Funktional invariant. Daraus folgt [10], daß alle Renormierungskonstanten in α symmetrisch sind. Für $\tilde{\mathcal{Z}}$ erhalte ich [8]

$$\tilde{\mathcal{Z}} = 1 + \frac{b}{64}\,\alpha^2 \ln \varkappa^2 a^2 + O(\alpha^4) \tag{4.10}$$

Die Konstante b ist gegeben durch das Integral

$$b = \int_0^\infty ds\ s^{-2} \exp\left\{ -2 \int_s^\infty dx\, x^{-1}\, e^{-x} \right\} = 2{,}3715\,4429\,6\ldots \tag{4.11}$$

Für $\Gamma^{12}_{q\omega}$ folgt die Renormierungsgruppengleichung

$$\left(\varkappa \partial_\varkappa + \beta_\alpha \partial_\alpha + \beta_\delta \partial_\delta + \gamma \zeta_\gamma \partial_\gamma \right. \tag{4.12}$$
$$\left. + m^2 \zeta_m \partial_{m^2} + \tilde{\zeta} \right) \Gamma^{12}_{q\omega}\left(\alpha, \delta, \gamma, m^2, \epsilon, \varkappa\right) = 0$$

mit β_α, β_δ und ζ_m wie (3.9), sowie

$$\zeta_\gamma = \left(\varkappa \partial_\varkappa \ln \gamma\right)_b = \frac{b-1}{32}\,\alpha^2 + O(\alpha^4) \tag{4.13a}$$

$$\tilde{\zeta} = \left(\varkappa \partial_\varkappa \ln \tilde{\mathcal{Z}}^{-1}\right)_b = -\frac{b}{32}\,\alpha^2 + O(\alpha^4) \tag{4.13b}$$

4.2 Skalenverhalten und kritische Exponenten in $d = 2 - \epsilon$ Dimensionen

$(0 \leq \epsilon \ll 1)$

Ich betrachte den dynamischen Strukturfaktor $S_{q\omega}$, gegeben durch die Fouriertransformation ($m = 0$)

$$\langle s(xt)\, s(00) \rangle = \int_{q\omega} \exp\left(i [qx - \omega t]\right) S_{q\omega} \tag{4.14}$$

der Korrelationsfunktion. Vermöge

$$S_{0\, q\omega}(\alpha_0, \delta_0, \gamma_0, \epsilon, a) = \tag{4.15}$$

$$= Z\, S_{q\omega}(\alpha, \delta, \gamma, \epsilon, n)$$

gilt die Renormierungsgruppengleichung

$$\left(n\partial_n + \beta_\alpha \partial_\alpha + \beta_\delta \partial_\delta + \gamma\, \zeta_\gamma \partial_\gamma + \zeta_S\right) S_{q\omega}(\alpha, \delta, \gamma, \epsilon, n) = 0 \tag{4.16}$$

mit $\beta_\alpha, \beta_\delta, \zeta_\gamma$ wie (4.12) und

$$\zeta_S = (n\partial_n \ln Z)_b - \tfrac{1}{32}\alpha^2 + O(\alpha^4) \tag{4.17}$$

Damit besitzt der dynamische Strukturfaktor im kritischen Bereich

$$|\delta - \delta_c(\alpha)| \ll 1 \;;\; \frac{q}{n} \ll 1 \;;\; \frac{\omega}{\gamma n^2} \ll 1 \tag{4.18}$$

die Skalenform [9] ($\pm : \delta \gtrless \delta_c(\alpha)$)

$$S_{q\omega} = \chi_q\, \omega_c(q)^{-1}\, f^{\pm}\left(\frac{\omega}{\omega_c(q)}, q\xi\right) \tag{4.19}$$

Dabei ist die charakteristische Frequenz

$$\omega_c(q) = q^z\, \Omega^{\pm}(q\xi) \tag{4.20}$$

mit dem (intrinsisch dynamischen) kritischen Exponenten

$$z = 2 + (b-1)\epsilon + \cdots \tag{4.21}$$

Für die (statische) Suszeptibilität χ_q gilt

$$\chi_q \sim q^{-2+\eta} \tag{4.22}$$

mit $\eta = \epsilon + \ldots$ (vgl. Kapitel 3), die Korrelationslänge ξ divergiert am kritischen Punkt für $\epsilon > 0$ wie

$$\xi \sim |\delta - \delta_c(\alpha)|^{-\nu} \tag{4.23}$$

mit $\nu^{-1} = 2\epsilon^{-1} + \ldots$ (vgl. Kapitel 3).

In d=2 Dimensionen ($\epsilon = 0$) divergiert der Exponent ν . Dies hat zur Folge, daß die Korrelationslänge nicht wie in (4.23) gemäß einem Potenzgesetz, sondern mit einer wesentlichen Singularität gemäß

$$\ln \xi \sim (\delta_c - \delta)^{-\nu_*} \tag{4.24}$$

divergiert. Der kritische Exponent ν_* hat den Wert [4,10]

$$\nu_* = \frac{1}{2} \tag{4.25}$$

5. Bewegungsgleichung in d=2 Dimensionen

5.1 Mean-Field Theorie

Zur Untersuchung des Roughening-Übergangs schlug Saito [26] ein selbstkonsistentes Verfahren vor, indem er die Wahrscheinlichkeitsverteilung der lokalen Variablen durch eine geeignete Gaussverteilung approximierte. Für räumlich homogenes Wachstum ($\mu = \mu(t)$, $h = h(t)$) findet er in der Nähe der Roughening-Temperatur die Bewegungsgleichung

$$\partial_t h + \gamma\, \xi_s^{-2} \sin\beta h = \gamma \mu \tag{5.1}$$

Für die Temperaturabhängigkeit der Korrelationslänge erhält Saito für $T < T_R$ das kritische Verhalten

$$\ln \xi_s \sim (T_R - T)^{-1} \tag{5.2}$$

Der kritische Exponent in (5.2) ist um einen Faktor 2 verschieden vom Resultat des exakt lösbaren (statischen) BCSOS-Modells [27]. In der rauhen Phase ($T > T_R$) divergiert die Korrelationslänge ($\xi_s^{-1} = 0$) . Daher ist dort die Wachstumsrate direkt proportional zur treibenden Kraft μ .

In der Tieftemperaturphase ($T < T_R$) ist die Korrelationslänge endlich, somit liefert nun der Sinus-Term in (5.1) einen wesentlichen Beitrag. Aus $-1 \le \sin\beta h \le 1$ folgt, daß der Kristall in einem sehr kleinen Feld μ nicht wachsen kann. Dies ist erst möglich oberhalb des spinodalen Grenzwertes

$$\mu_0 = \xi_s^{-2} \tag{5.3}$$

Für $0 \le \mu \le \mu_0$ liegt ein metastabiler Zustand vor. Spontane Schwankungen und dadurch bedingte Nukleationsprozesse sind dort für das Kristallwachstum entscheidend. Dieser Mechanismus kann in Saito's Gauss-Approximation nicht behandelt werden.

Für $\mu > \mu_0$ wächst der Kristall vermöge der Evolutionsgleichung

$$\partial_t h = \gamma \left[\mu - \mu_0 \sin\beta h \right] \tag{5.4}$$

Für zeitunabhängige äußere Kraft μ = const. besitzt diese

Gleichung zur Anfangsbedingung

$$h(t=0) = 0 \tag{5.5}$$

die Lösung

$$\gamma\mu \tan\left[\tfrac{1}{2}\beta h(t)\right] = \gamma\mu_0 + \frac{\omega}{\beta} \tan\left(\tfrac{\omega}{2}t - \varphi\right) \tag{5.6}$$

mit $\omega = \beta\gamma\,(\mu^2-\mu_0^2)^{\frac{1}{2}}$

$$\tan\varphi = \gamma\beta\mu_0\omega^{-1} \tag{5.7}$$

Die Wachstumsrate oszilliert zwischen $\gamma(\mu-\mu_0)$ und $\gamma(\mu+\mu_0)$. Die Periode der Oszillation entspricht der Zeit, in der die mittlere Kristallhöhe um eine Atomlage gewachsen ist:

$$2\pi\omega^{-1} = \frac{2\pi}{\beta\gamma}\,(\mu^2-\mu_0^2)^{-\frac{1}{2}} \tag{5.8}$$

Die mittlere Wachstumsrate R ist gegeben durch

$$R = \frac{\omega}{2\pi}\int_0^{2\pi\omega^{-1}} dt\;\partial_t h = \gamma(\mu^2-\mu_0^2)^{\frac{1}{2}} \tag{5.9}$$

Diese erreicht für $\mu \gg \mu_0$ den Wert $R = \gamma\mu$, den sie in der rauhen Phase besitzt.

Abbildung 4 bzw. 5 zeigen die mittlere Wachstumsrate als Funktion der äußeren Kraft oberhalb bzw. unterhalb der Roughening-Temperatur [26].

5.2 Monte Carlo Simulation

Ein wesentlicher Fortschritt im Verständnis der grundlegenden Aspekte des Kristallwachstums wurde in den letzten Jahren vor allem mit dem Studium des kinetischen Ising- (bzw. Gittergas-) Modells [28] erzielt. Prozesse wie Kondensation und Verdampfung von Atomen oder Umlagerung innerhalb der Oberfläche lassen sich ebenso im Detail studieren wie der Einfluß von Gitterfehlern (etwa Schraubenversetzungen) oder Verunreinigungen mit Fremdatomen auf die Wachstumsrate [29].

Gewöhnlich vernachlässigt man Konfigurationen, in denen Überhänge auftreten. So erhält man das Solid-on-Solid Modell [30].

Die Konfiguration der Oberfläche läßt sich dann durch einen Satz ganzer Zahlen $\{h_i\}$ beschreiben. Für die Energie einer Konfiguration gilt dann (ϕ = const.)

$$\mathcal{H}_{SOS} = \frac{\phi}{2} \sum_{<ij>} |h_i - h_j| \qquad (5.10)$$

($\sum_{<ij>}$: Summation über nächste Nachbarn)

Dieses Modell wird nun einer Dynamik unterworfen, indem der Oberfläche stochastisch Atome angelagert oder entrissen werden. Dabei wird gewöhnlich angenommen, daß die Anlagerungsrate k_+ unabhängig von der Konfiguration der Oberfläche ist und man setzt [29]

$$k_+ = k_{eq} \exp(\beta \Delta\mu) \qquad (\beta^{-1} = k_B T) \qquad (5.11)$$

Dabei ist $\Delta\mu$ die Differenz im chemischen Potential beider Phasen, die im thermischen Gleichgewicht verschwindet.

Für die Verdampfungsrate eines Atoms mit m lateralen bonds verwendet man den Ansatz [29]

$$k_-(m) = \nu \exp(-\beta m \phi) \qquad (5.12)$$

Hier ist ν die Verdampfungsrate eines isolierten Adatoms.

Abbildung 6 zeigt typische Resultate einer Monte Carlo Simulation [29] für die Wachstumsrate $\bar{R}$ in diesem Modell. Die gestrichelte Kurve bezieht sich auf die Wilson-Frenkel Theorie [31]

$$R_{WF} = k_{eq} [\exp(\beta\Delta\mu) - 1] \qquad (5.13)$$

Für die Roughening-Temperatur findet man [29]

$$\beta_R \phi \lesssim 1{,}67 \qquad (5.14)$$

Oberhalb des Roughening-Übergangs ($\beta < \beta_R$) findet man für $\beta\Delta\mu \ll 1$ ein lineares Gesetz

$$\bar{R} \sim \Delta\mu \qquad (5.15)$$

Unterhalb der Roughening-Temperatur ($\beta > \beta_R$) liefert für $\beta\Delta\mu \ll 1$ die klassische Nukleationstheorie [32]

$$\bar{R} \sim (\beta\Delta\mu)^{\frac{5}{6}} \exp\left(-\beta \frac{\phi^2}{3\Delta\mu}\right) \qquad (5.16)$$

gute Übereinstimmung mit den MC-Ergebnissen [29].

5.3 Linear-Response Theorie

Chui und Weeks [2] untersuchten die Dynamik des Roughening-Übergangs mit Hilfe der Renormierungsgruppenmethode von Kosterlitz [4] und José et al. [33] . Der von diesen Autoren gefundene Fluß der Parameter α , δ und γ unter der Renormierungsgruppe stimmt bis auf eine nichtuniverselle Konstante in der Gleichung für γ mit dem in Kapitel 4 angegebenen Resultat überein.

Die beiden Autoren bestimmen die Wachstumsrate R mit Hilfe der linearen Responsefunktion und finden in erster Ordnung bezüglich μ das Resultat

$$R = \begin{cases} \gamma\mu \exp\left\{(\delta^2-\delta_R^2)^{\frac{1}{2}} - \delta\right\} & \text{für } \delta \geq \delta_R \\ 0 & \text{für } \delta < \delta_R \end{cases} \qquad (5.17)$$

Dabei ist $\delta_R = \frac{1}{\beta}\alpha$ die (reduzierte) Temperatur des Roughening-Übergangs. Gleichung (5.17) sagt aus, daß unterhalb der Roughening-Temperatur überhaupt kein Kristallwachstum auftritt. Diese Aussage weist auf das Versagen der linearen Response-Theorie hin. Computer-Simulationen zeigen (vergleiche Kapitel 5.2), daß unterhalb der Roughening-Temperatur für kleine Werte der treibenden Kraft $\mu \ll \xi^{-2}$ die Wachstumsrate praktisch übereinstimmt mit dem Ergebnis

$$\ln \frac{R}{R_0} \sim -\mu^{-1} \qquad (5.18)$$

der klassischen Nukleationstheorie [32]. Das bedeutet, daß alle Ableitungen von R nach μ bei $\mu = 0$ verschwinden und eine Entwicklung von R nach Potenzen von μ nicht möglich ist.

Für $\delta > \delta_R$, $\delta - \delta_R \ll 1$ sagt Gleichung (5.17) eine Anomalie in der Temperaturabhängigkeit der Wachstumsrate bei δ_R voraus. Die Korrelationslänge zeigt für $\delta \to \delta_R$ (von unten) das für einen Kosterlitz-Thouless Übergang charakteristische Verhalten

$$\ln \frac{\xi}{a} \sim (\delta_R - \delta)^{-\nu_*} \quad ; \quad \nu_* = \frac{1}{2} \qquad (5.19)$$

(Vergleiche mit dem Ergebnis $\nu_* = 1$ in Saito's Mean-Field Theorie, Kapitel 5.1)

5.4 Dynamische Renormierungsgruppentheorie

Zunächst betrachte ich eine von Bausch und Janssen [34] vorgeschlagene Darstellung der Bewegungsgleichung, die sich für dynamische Renormierungsgruppenmethoden als besonders zweckmäßig erwiesen hat. Dazu betrachte man das erzeugende Funktional der Vertexfunktionen, welches sich vermöge der Legendre-Transformation

$$\Gamma[\underline{M}] = -W[\underline{H}] + (\underline{H},\underline{M}) \tag{5.20}$$

aus dem erzeugenden Funktional der Kumulanten

$$W[\underline{H}] = \ln\left(Z[\underline{H}] / Z_G[0]\right) \tag{5.21}$$

gewinnen läßt. Dabei ist

$$\underline{M} = \frac{\delta W}{\delta \underline{H}} = (\tilde{M}, M) \tag{5.22}$$

der Erwartungswert von $\underline{s} = (\tilde{s}, s)$. $Z_G[\underline{H}]$ ist das Funktional (4.1), berechnet mit dem Gaussischen Wirkungsfunktional (4.3). Aus (4.1) und (4.2) folgt, daß das Feld $\tilde{H}$ additiv zur Kraft $-\gamma \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta s}$ in der Langevingleichung (2.1) hinzutritt. Daher identifiziert man sofort

$$\mu = \gamma^{-1} \tilde{H} \tag{5.23}$$

als die äußere treibende Kraft, die durch eine Differenz im chemischen Potential der beiden Phasen hervorgerufen wird. Daraus folgt dann [34] die Bewegungsgleichung

$$\gamma u(xt) = \tilde{H}(xt) = \frac{\delta \Gamma}{\delta \tilde{M}(xt)}\Big|_{\tilde{M}=0} =: F\left(xt, [M]\right) \tag{5.24}$$

für die Höhenkoordinate $h(xt) = M(xt) = \langle s(xt)\rangle$ der Phasentrennfläche.

Um diese Gleichung in der Nähe des Roughening-Übergangs auszuwerten, untersuche ich deren Transformationsverhalten unter der Renormierungsgruppe. Folgt man dem in Kapitel 4 dargestellten Weg, so erhält man die Skalenform

$$\gamma u(xt) = \frac{\gamma}{\bar{\gamma}(\ell)} F\left(xt, [\bar{M}(\ell)]; \bar{\alpha}(\ell), \bar{\delta}(\ell), \bar{\gamma}(\ell), \overline{w^2}(\ell), \bar{n}(\ell)\right) \tag{5.25}$$

Die Größen $\bar{\alpha}(\ell)$, $\bar{\delta}(\ell)$, $\bar{\gamma}(\ell)$, $\overline{w^2}(\ell)$ und $\bar{n}(\ell)$ sind die Lösungen der charakteristischen Gleichungen der in Kapitel 3,4 diskutierten Renormierungsgruppengleichungen mit der Anfangsbedingung

$$\bar{\alpha}(1)=\alpha\,;\ \bar{\delta}(1)=\delta\ ;\ \bar{\gamma}(1)=\gamma\ ;\ \overline{m^2}(1)=m^2\ ;\ \bar{\kappa}(1)=\kappa \tag{5.26}$$

Ferner sind $\bar{H}(xt;\ell)$ und $\bar{\gamma}(\ell)$ die Lösungen der charakteristischen Gleichungen

$$\ell\,\partial_\ell \ln \bar{H}(xt,\ell) = \tfrac{1}{2}\,\beta\left[\bar{\alpha}(\ell),\bar{\delta}(\ell)\right] \tag{5.27}$$

$$\ell\,\partial_\ell \ln \bar{\gamma}(\ell) = \tfrac{1}{2}\,\beta\left[\bar{\alpha}(\ell),\bar{\delta}(\ell)\right] - \tilde{\beta}\left[\bar{\alpha}(\ell),\bar{\delta}(\ell)\right]$$

zur Anfangsbedingung

$$\bar{H}(xt,1) = h(xt)\ ;\ \bar{\gamma}(1)=\gamma \tag{5.28}$$

Oberhalb der Roughening-Temperatur ist $\delta > \delta_R(\alpha) = \frac{1}{8}\,\alpha$. Daher strebt $\bar{\alpha}$ für $\ell \to 0$ gegen den Fixpunktwert $\alpha_* = 0$, die Theorie ist hier für $\ell \to 0$ asymptotisch frei [10]. Aus (5.25) folgt dann sofort die Bewegungsgleichung

$$\left[\partial_t - \gamma(0)\,\Delta\right] h(xt) = \sigma(xt) \tag{5.29}$$

mit

$$\gamma(0) = \gamma \exp\left\{(b-1)\left[\left(\delta^2-\delta_R^2\right)^{\frac{1}{2}} - \delta\right]\right\} \tag{5.30}$$

$$\sigma(xt) = \gamma\,\mu(xt)\exp\left\{b\left[\left(\delta^2-\delta_R^2\right)^{\frac{1}{2}} - \delta\right]\right\} \tag{5.31}$$

In einem konstanten äußeren Feld $\mu(xt)=\mu=\text{const.}$ stimmt somit die Wachstumsrate

$$R = \gamma\mu \exp\left\{b\left[\left(\delta^2-\delta_R^2\right)^{\frac{1}{2}} - \delta\right]\right\} \quad (\delta > \delta_R) \tag{5.32}$$

(bis auf die nichtuniverselle Konstante b) mit dem Ergebnis der linearen Responsetheorie (5.17) überein.

Unterhalb der Roughening-Temperatur ($\delta < \delta_R$) strebt das Argument von F in (5.25) für $\ell \to 0$ aus dem kritischen Bereich hinaus (vergleiche Abbildung 2). Durch geeignete Wahl von ℓ [20] ist es daher möglich, in ein Gebiet des Parameterraumes zu gelangen, in dem die Mean-Field Theorie eine brauchbare Näherung darstellt.

Im Rahmen einer Feldtheorie erhält man die Mean-Field Theorie in niedrigster Ordnung (tree-approximation) einer systematischen Loop-Entwicklung [36]. Für die Formulierung innerhalb der renormierten Theorie ist es zunächst erforderlich, eine systematische Loop-Entwicklung der Renormierungskonstanten durchzuführen. Die in Kapitel 3,4 bestimmten Renormierungskonstanten Z, $\tilde{Z}$ und Z_α sind definiert durch die Renormierungsbedingungen (vergleiche [10])

$$\Gamma^{12}_{q=0,\omega=0}\left(\alpha,\delta,\gamma,m^2=\tfrac{1}{c}\varkappa^2,\varkappa\right) = \gamma\left(\frac{\varkappa^2}{c}+\alpha\varkappa^2\right) \tag{5.29a}$$

$$\partial_{q^2}\Gamma^{12}_{q\omega}\left(\alpha,\delta,\gamma,m^2=\tfrac{1}{c}\varkappa^2,\varkappa\right)\Big|_{q=0,\omega=0} = \gamma \tag{5.29b}$$

$$\partial_{\omega}\Gamma^{12}_{q\omega}\left(\alpha,\delta,\gamma,m^2=\tfrac{1}{c}\varkappa^2,\varkappa\right)\Big|_{q=0,\omega=0} = -i \tag{5.29c}$$

In der niedrigsten Ordnung einer Loop-Entwicklung gilt

$$\Gamma^{12\ \mathrm{tree}}_{0\,q\omega} = -i\omega + \gamma_0(q^2+m_0^2) + \alpha_0\gamma_0\frac{1}{a^2} \tag{5.30}$$

Einsetzen von (5.30) in (5.29) liefert unter Berücksichtigung der Definition der renormierten Theorie (4.6),(4.7)

$$Z^{\mathrm{tree}} = 1\ ;\ \tilde{Z}^{\mathrm{tree}} = 1\ ;\ Z_\alpha^{\mathrm{tree}} = a^2\varkappa^2 \tag{5.31}$$

Das Vertexerzeugende Funktional ist daher in der tree-approximation gegeben durch

$$\Gamma^{\mathrm{tree}}[\tilde{M},M] = -\int d^2x\,dt\,\Big\{\gamma\tilde{M}^2 - \tilde{M}\left[\partial_t-\gamma(\Delta-m^2)\right]M - \alpha\gamma\varkappa^2\beta^{-1}\sin[\beta M]\,\tilde{M}\Big\} \tag{5.32}$$

Durch Einsetzen von (5.32) in (5.24) erhält man aus (5.25) die Mean-Field Näherung der Bewegungsgleichung

$$\gamma\mu(xt) = \frac{\gamma}{\bar{\gamma}(\ell)}\Big\{\left[\partial_t-\gamma(\Delta-m^2)\right]\bar{M}(xt,\ell) + \bar{\alpha}(\ell)\bar{\gamma}(\ell)\bar{\varkappa}^2(\ell)\,\bar{\beta}^{-1}(\ell)\sin\beta h(xt)\Big\} \tag{5.33}$$

Dabei wurde berücksichtigt, daß mit

$$\bar{\beta}(\ell) = \frac{1}{3\pi}\left[\bar{\delta}(\ell)-1\right] \tag{5.34}$$

$$\ell\partial_\ell\left[\bar{\beta}(\ell)\,\bar{M}(xt,\ell)\right] = 0 \tag{5.35}$$

gilt.

Der Flowparameter ℓ muß nun so gewählt werden, daß $\bar{\alpha}(\ell)$, $\bar{\delta}(\ell)$ im unkritischen Bereich liegen. Dies geschieht zweckmäßigerweise durch die Bedingung

$$\bar{\delta}(\ell) = 0 \tag{5.36}$$

Dies führt auf

$$\ell = \exp\left(-\frac{1}{\tau}\arctan\frac{2\delta}{\tau}\right) \tag{5.37}$$

wobei

$$\tau = 2\left[\delta_R^2 - \delta^2\right]^{\frac{1}{2}} \geq 0 \tag{5.38}$$

der Quadratwurzel aus dem Temperaturabstand zum Roughening-Übergang proportional ist. Setzt man nun die Flow-Gleichungen [37]

$$\frac{1}{4}\bar{\alpha}(\ell) = \frac{\tau}{\cos\varphi(\ell)}\ ;\quad 2\bar{\delta}(\ell) = \tau\tan\varphi(\ell) \tag{5.39}$$

mit

$$\varphi(\ell) = \tau\ln\ell + \varphi(1) \tag{5.40}$$

sowie

$$\bar{\gamma}(\ell) = \gamma\exp\left\{(b-1)\left[\bar{\delta}(\ell) - \delta\right]\right\} \tag{5.41}$$

$$\bar{h}(xt,\ell) = h(xt)\exp\left\{-\tfrac{1}{2}\left[\bar{\delta}(\ell) - \delta\right]\right\} \tag{5.42}$$

$$\bar{y}(\ell) = y\exp\left\{(b-\tfrac{1}{2})\left[\bar{\delta}(\ell) - \delta\right]\right\} \tag{5.43}$$

unter Berücksichtigung der Matching-Bedingung [20](5.36) in (5.33) ein, so erhält man für $m=0$, $\delta<\delta_R$ die abschließende Form der Bewegungsgleichung

$$\left[\partial_t - \bar{\gamma}\Delta\right]h(xt) + \bar{\gamma}\xi^{-2}\sin\beta h(xt) = \bar{\gamma}\bar{\mu}(xt) \tag{5.44}$$

Darin ist $(\delta_R - \delta \ll 1)$

$$\bar{\gamma} = \gamma\exp\left\{-(b-1)\delta_R\right\} \tag{5.45}$$

$$\xi = \frac{\pi^{\frac{1}{4}}}{2\varkappa}\delta_R^{-\frac{1}{4}}(\delta_R-\delta)^{-\frac{1}{4}}\exp\left\{\frac{\pi}{4}(2\delta_R)^{-\frac{1}{2}}(\delta_R-\delta)^{-\frac{1}{2}}\right\} \tag{5.46}$$

$$\bar{\mu}(xt) = \mu(xt)\exp(-\delta_R) \tag{5.47}$$

Durch Übergang zum statischen Grenzfall identifiziert man ξ als Korrelationslänge, deren kritisches Verhalten für $\delta \to \delta_R$ (von unten) gegeben ist durch

$$\ln(\xi_R) \sim (\delta_R - \delta)^{-\nu_*} + O\left(\ln(\delta_R - \delta)\right) \qquad (5.48)$$

mit dem kritischen Exponenten [10]

$$\nu_* = \frac{1}{2} \qquad (5.49)$$

Für räumlich homogenes Wachstum $\left(\mu = \mu(t), h(x0)=0\right)$ ist Gleichung (5.44) vom gleichen Typ wie Saito's [26] Ergebnis (5.1) der Gauss-Approximation. Dies ist sofort verständlich auf Grund der Tatsache, daß ich die Bewegungsgleichung aus ihrer Mean-Field Form im unkritischen Bereich hergeleitet habe.

Abgesehen von der Tatsache, daß der kinetische Koeffizient bzw. das chemische Potential durch ihre leicht veränderten renormierten Werte $\bar{\gamma}$ und $\bar{\mu}$ zu ersetzen sind, liefert die Fortsetzung der Bewegungsgleichung mit Hilfe der Renormierungsgruppe in den kritischen Bereich den Wert $\nu_* = \frac{1}{2}$ für den kritischen Exponenten der Korrelationslänge. Dieser Wert des Exponenten stimmt mit dem Ergebnis der Kosterlitz-Thouless Theorie [4,33], der linearen Responsetheorie [2] (vergleiche Kapitel 5.3) und dem exakt lösbaren BCSOS-Modell überein, unterscheidet sich also von Saito's Resultat [26] um einen Faktor 2.

Für räumlich und zeitlich konstante äußere Bedingungen (μ = const.) läßt sich die Lösung von (5.44) für homogene Anfangsbedingungen $\left(h(x,t=0) = \text{const.}\right)$ sofort angeben [26] (vergleiche Kapitel 5.1). Unterhalb des spinodalen Grenzwertes μ_s, gegeben durch

$$\bar{\mu}_s = \mu_s e^{-\delta_R} = \xi^{-2} \qquad (5.50)$$

besitzt die Lösung von (5.44) das Langzeitverhalten

$$h(t) \xrightarrow[\infty]{t} \text{const.} \qquad (5.51)$$

Für $\mu > \mu_s$ lautet die Lösung von (5.44) zur Anfangsbedingung $h(x,t=0)=0$

$$\bar{\gamma}\bar{\mu}\tan\left[\tfrac{1}{2}\beta h(t)\right] = \bar{\gamma}\bar{\mu}_s + \frac{\omega}{\beta}\tan\left(\tfrac{\omega}{2}t - \varphi\right) \qquad (5.52)$$

mit

$$\omega = \beta\bar{\gamma}(\bar{\mu}^2 - \bar{\mu}_s)^{\frac{1}{2}} \; ; \; \tan\varphi = \bar{\gamma}\bar{\mu}_s\beta\,\omega^{-1} \tag{5.53}$$

Vermöge (5.52) oszilliert die Wachstumsrate $\partial_t h$ zwischen $\bar{\gamma}(\bar{\mu}-\bar{\mu}_s)$ und $\bar{\gamma}(\bar{\mu}+\bar{\mu}_s)$ mit der (Kreis-) Frequenz ω. Die mittlere Wachstumsrate in diesem Bereich erhält man aus (5.53) zu

$$R = \bar{\gamma}\left(\bar{\mu}^2 - \bar{\mu}_s^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{5.54}$$

Nach Gleichung (5.51) verschwindet die Wachstumsrate für $\mu < \mu_s$ Dieses Ergebnis deutet auf das Versagen der Näherung (5.33) zur Beschreibung von Nukleationsprozessen hin. Das kritische Verhalten des spinodalen Grenzwertes

$$\ln \frac{\mu_s}{\chi^2} \sim (\delta_R - \delta)^{-\frac{1}{2}} + O(\ln(\delta_R - \delta)) \tag{5.55}$$

stimmt genau mit dem kritischen Verhalten der Temperaturabhängigkeit der freien Energie pro Längeneinheit einer Stufe (step free energy per length) im exakt lösbaren BCSOS-Modell [27] überein. Das Auftreten eines spinodalen Grenzwertes μ_s bei Verwendung der Näherung (5.33) geht daher mit der Existenz eines kritischen Tröpfchenradius [38] beim Wachstum durch thermische Aktivierung Hand in Hand.

6. Diskussion

Die dynamische Renormierungsgruppentheorie des sine-Gordon Modells legt folgendes Bild für das Kristallwachstum in der Nähe des Roughening-Übergangs einer Kristall-Gas Phasentrennfläche nahe:

Oberhalb der Roughening-Temperatur T_R wächst der Kristall (unter zeitlich konstanten äußeren Bedingungen) linear in der Zeit mit einer Wachstumsrate, die der Differenz $\Delta\mu$ im chemischen Potential beider Phasen proportional ist. Bei Annäherung an die Roughening-Temperatur zeigt sich eine Anomalie in Form einer Wurzelsingularität in der Temperaturabhängigkeit der Wachstumsrate, die den auftretenden Roughening-Phasenübergang signalisiert.

Unterhalb der Roughening-Temperatur erfolgt das Kristallwachstum durch thermische Aktivierung. Die dabei auftretenden Nukleationsprozesse werden in der vorliegenden Arbeit nicht adäquat beschrieben, da sie von einer Mean-Field Approximation im unkritischen Bereich startet. Typischerweise äußert sich Tröpfchenbildung in mean-field-ähnlichen Theorien in dem Auftreten metastabiler Bereiche. Dies ist zum Beispiel von der Van-der-Waals-Theorie des Koexistenzgebietes einer Flüssigkeit mit ihrem Dampf wohlbekannt [38].

Der Fortschritt der vorliegenden Arbeit, die sich der Methode der Renormierungsgruppe [39] bedient, liegt im Vergleich zu älteren Theorien [32] vor allem in der Aussage (5.55) über die Temperaturabhängigkeit des spinodalen Grenzwertes μ_s und damit des kritischen Tröpfchenradius.

Insgesamt zeigt die vorliegende Arbeit, daß die Kristallwachstumsrate, wie schon von Chui und Weeks [2] vermutet, ein geeigneter Kandidat für die experimentelle Suche nach dem Roughening-Übergang ist.

Anhang

A. Zur diskreten Translationsinvarianz

Betrachtet werde ein reelles Skalarfeld $S(x)$ und die "Hamiltonfunktion"

$$H[s] = H_G[s] + V[s] \tag{A.1}$$

Dabei ist $H_G[s]$ der gaussische Anteil der Hamiltonfunktion. Es existiere ein festes Feld $L(x)$ derart, daß für die "Wechselwirkung" $V[s]$ gilt

$$V[s+L] = V[s] \qquad \text{für alle } S \tag{A.2}$$

Dann gilt für das Vertexerzeugende Funktional

$$\Gamma[M] = H_G[M] + P[M] \tag{A.3}$$

mit

$$P[M+L] = P[M] \qquad \text{für alle } M \tag{A.4}$$

Dies bedeutet, daß der nichtgaussische Anteil des Vertexerzeugende Funktionals ebenfalls die diskrete Translationsinvarianz (A.2) aufweist.

Zum Beweis von (A.3), (A.4) (vergleiche [11]) schreibe man mit einem geeignet zu definierenden Skalarprodukt sowie einem bezüglich dieses Skalarproduktes selbstadjungierten Kern G^{-1}

$$H_G[s] = \tfrac{1}{2}(s, G^{-1}s) = \tfrac{1}{2}\int dx\,dx'\, s(x)\, G^{-1}(x,x')\, s(x') \tag{A.5}$$

Definiert man für beliebige Funktionale $A[s]$ den gaussischen Erwartungswert

$$\langle A[s] \rangle_G := \frac{\int d[s]\, A[s] \exp\{-\frac{1}{2}(s, G^{-1}s)\}}{\int d[s] \exp\{-\frac{1}{2}(s, G^{-1}s)\}} \tag{A.6}$$

so gilt

$$\langle A[s]\, e^{(h,s)} \rangle_G = \tag{A.7}$$

$$= \langle e^{(h,s)} \rangle_G \cdot \frac{\int d[s]\, A[s] \exp\{-\frac{1}{2}(s, G^{-1}s) - (h,s)\}}{\int d[s] \exp\{-\frac{1}{2}(s, G^{-1}s) + (h,s)\}}$$

Führt man im zweiten Faktor neue Integrationsvariablen

$$s(x) \longrightarrow s'(x) = s(x) - \int dx' \, G(x,x') \, h(x') \tag{A.8}$$

ein, so erhält man die Identität

$$\langle A[s] \, e^{(h,s)} \rangle_G = \langle A[s+Gh] \rangle_G \, \langle e^{(h,s)} \rangle_G \tag{A.9}$$

Dabei ist

$$(Gh)(x) = \int dx' \, G(x,x') \, h(x') \tag{A.10}$$

Das Kumulantenerzeugende Funktional

$$W[h] = \ln \left(Z[h] \, / \, Z_G[0] \right) \tag{A.11}$$

mit

$$Z[h] = \int d[s] \exp \{ - H[s] + (h,s) \} \tag{A.12}$$

$$Z_G[h] = \int d[s] \exp \{ - H_G[s] + (h,s) \} \tag{A.13}$$

hat die Gestalt

$$W[h] = \ln \langle \exp \{ -V[s] + (h,s) \} \rangle_G \tag{A.14}$$

Vermöge

$$\langle e^{(h,s)} \rangle_G = e^{\frac{1}{2}(h,Gh)} \tag{A.15}$$

erhält man mit (A.9) aus (A.14)

$$W[h] = \tfrac{1}{2}(h,Gh) + I[h] \tag{A.16}$$

Dabei ist

$$I[h] = \ln \langle \exp \{ - V[s+Gh] \} \rangle_G \tag{A.17}$$

Sei

$$I'(x,[h]) := \frac{\delta I[h]}{\delta h(x)} \tag{A.18}$$

und

$$\Lambda(x) := \int dx' \, G^{-1}(x,x') \, L(x') \tag{A.19}$$

Dann gilt mit (A.2), (A.17)

$$I[h+\Lambda] = I[h] \qquad \text{für alle } h \tag{A.20}$$

$$I'(x,[h+\Lambda]) = I'(x,[h]) \qquad \text{für alle } h, x \tag{A.21}$$

Betrachtet werde nun die Zustandsgleichung [36]

$$M(x) := \frac{\delta W[h]}{\delta h(x)} =: F(x,[h]) \tag{A.22}$$

Wie üblich sei angenommen, daß diese nach $h(x)$ aufgelöst werden kann:

$$h(x) = F^{-1}(x,[M]) \tag{A.23}$$

mit

$$F^{-1}(x,[F[h]]) = h(x) \tag{A.24}$$

Mit (A.16) folgt aus (A.22)

$$F(x,[h]) = \int dx' G(x,x') h(x') + I'(x,[h]) \tag{A.25}$$

Daher gilt

$$F(x,[h+\Lambda]) = F(x,[h]) + L(x) \tag{A.26}$$

Somit ist

$$F^{-1}(x,[F[h]+L]) = F^{-1}(x,[F[h+\Lambda]]) \tag{A.27}$$

Mit (A.22) und (A.24) folgt dann

$$F^{-1}(x,[M+L]) = F^{-1}(x,[M]) + \Lambda(x) \tag{A.28}$$

Nun betrachte man das Funktional

$$R(x,[M]) := F^{-1}(x,[M]) - \int dx' G^{-1}(x,x') M(x') \tag{A.29}$$

Aus (A.19) und (A.28) folgt dann

$$R(x,[M+L]) = R(x,[M]) \qquad \text{für alle } M, x \tag{A.30}$$

Ich betrachte nun das Vertexerzeugende Funktional [36]

$$\Gamma[M] := -W[F^{-1}[M]] + (F^{-1}[M], M) \tag{A.31}$$

Einsetzen von (A.16) und (A.29) ergibt

$$\Gamma[M] = \tfrac{1}{2}\,(M, G^{-1}M) + P[M] \qquad \text{(A.32)}$$

mit

$$P[M] = -\tfrac{1}{2}\,(R[M], G\,R[M]) - I\left[F^{-1}[M]\right] \qquad \text{(A.33)}$$

Aus (A.20) und (A.30) folgt dann

$$P[M+L] = P[M] \qquad \text{(A.34)}$$

(A.32) und (A.34) sind die Behauptungen (A.3) bzw. (A.4).

B. Zur Renormierung des Massenterms

Das zweidimensionale massive sine-Gordon Modell ist definiert durch die Hamiltonfunktion

$$H_0[s_0] = \int d^2x \left\{ \tfrac{1}{2}(\nabla s_0)^2 + \tfrac{1}{2} m_0^2 s_0^2 - \frac{\alpha_0}{a^2\beta_0^2} \cos\beta_0 s_0 \right\} \qquad (B.1)$$

Der Index Null bezeichnet unrenormierte Größen. Das Feld $L_0(x)$ aus Anhang A identifiziert man sofort zu

$$L_0(x) = \frac{2\pi}{\beta_0} \qquad \text{für alle } x \qquad (B.2)$$

Daher gilt nach Anhang A

$$\Gamma_0[M_0] = \int d^2x \left\{ \tfrac{1}{2}(\nabla M_0)^2 + \tfrac{1}{2} m_0^2 M_0^2 \right\} + P_0[M_0] \qquad (B.3)$$

mit

$$P_0[M_0 + L_0] = P_0[M_0] \qquad \text{für alle } M_0 \qquad (B.4)$$

Mit Amit et al. [10] definiere ich nun renormierte Größen

$$s_0^2 = Z s^2 \; ; \; \alpha_0 = Z_\alpha \alpha^2 \; ; \; \beta_0^2 = Z^{-1} \beta^2 \qquad (B.5)$$

sowie

$$m_0^2 = Z^{-1} Z_m m^2 \qquad (B.6)$$

Amit et al. vermuten, daß die Renormierung der Masse trivial ist, das heißt

$$Z_m = 1 \qquad (B.7)$$

und zeigen dies für die ersten drei Ordnungen der Störungsrechnung.

Aus den Relationen (B.3) und (B.4) folgt, daß (B.7) exakt ist und somit in jeder Ordnung der Störungsrechnung erfüllt ist. Dies läßt sich wie folgt einsehen.

Zunächst ist wegen (B.5)

$$M_0^2 = Z M^2 \qquad (B.8)$$

Für das renormierte Vertexerzeugende Funktional

$$\Gamma[M] = \Gamma_0[Z^{\frac{1}{2}} M] \qquad (B.9)$$

gilt daher wegen (B.3)

$$\Gamma[M] = \int d^2x \left\{ \frac{1}{2} Z (\nabla M)^2 + \frac{1}{2} Z_m m^2 M^2 \right\} + P[M] \qquad \text{(B.10)}$$

mit $$P[M] = P_0 [Z^{\frac{1}{2}} M] \qquad \text{(B.11)}$$

Auf der rechten Seite von (B.10) sind alle Größen durch ihre renormierten Ausgaben ausgedrückt. Aus (B.4) folgt

$$P[M+L] = P[M] \qquad \text{für alle } M \qquad \text{(B.12)}$$

wobei

$$L(x) := Z^{-\frac{1}{2}} L_0(x) = \frac{2\pi}{\beta} \qquad \text{(B.13)}$$

eingesetzt wurde. Definiert man

$$A[M] := \int d^2x \, \frac{\delta^2 \Gamma[M]}{\delta M(x) \delta M(0)} \qquad \text{(B.14)}$$

$$B[M] := \int d^2x \, \frac{\delta^2 P[M]}{\delta M(x) \delta M(0)} \qquad \text{(B.15)}$$

so gilt mit (B.10)

$$A[M] = Z_m m^2 + B[M] \qquad \text{(B.16)}$$

und

$$B[M+L] = B[M] \qquad \text{(B.17)}$$

Das Funktional $A[M]$ ist per definitionem frei von Ultraviolettdivergenzen. Diese Aussage gilt insbesondere für konstante Funktionen

$$M(x) = \lambda \qquad \text{für alle } x \qquad \text{(B.18)}$$

für die ich schreibe

$$A[M] =: A(\lambda) \; , \; B[M] =: B(\lambda) \qquad \text{(B.19)}$$

$B(\lambda)$ ist periodisch mit Periode L. Wegen (B.12) und (B.15) ist somit

$$\frac{1}{L} \int_0^L d\lambda \, B(\lambda) = 0 \qquad \text{(B.20)}$$

Daraus folgt mit (B.16)

$$Z_m = \frac{1}{m^2 L} \int_0^L d\lambda\, A(\lambda) \tag{B.21}$$

Z_m ist somit frei von Ultraviolett-Singularitäten. Das bedeutet im minimalen Renormierungsschema von Amit et al.

$$Z_m = 1 \tag{B.7}$$

C. Wick-Theorem für $\sin\beta s$, $\cos\beta s$ - Felder

Ich betrachte den zusammengesetzten "Operator"

$$A(x_1,\dots,x_{2N};y_1,\dots,y_M;[s]): \tag{C.1}$$
$$= \sin\beta s(x_1)\cdots\sin\beta s(x_{2N})\cos\beta s(y_1)\cdots\cos\beta s(y_M)$$

Vermöge der Identitäten

$$\sin x = \frac{1}{2i}\sum_{\epsilon=\pm1}\epsilon\, e^{i\epsilon x} \tag{C.2}$$

$$\cos x = \frac{1}{2}\sum_{\epsilon=\pm1} e^{i\epsilon x} \tag{C.3}$$

wird daraus

$$A(x_1,\dots,x_{2N};y_1,\dots,y_M;[s]) \tag{C.4}$$
$$= \frac{(-1)^N}{2^{2N+M}}\sum_{\epsilon_1=\pm1}\cdots\sum_{\epsilon_{2N+M}=\pm1}\epsilon_1\cdots\epsilon_{2N}\; e^{i\beta\sum_{m=1}^{2N+M}\epsilon_m s(x_m)}$$

Ferner gilt (vergleiche (A.6))

$$\left\langle e^{\sum_i a_i s(x_i)}\right\rangle_G = e^{\frac{1}{2}\sum_{ij} a_i G(x_i,x_j) a_j} \tag{C.5}$$

Im Folgenden setze ich stets Translationsinvarianz

$$G(x_i,x_j) = G(x_i-x_j) \tag{C.6a}$$

und Inversionssymmetrie

$$G(x_i-x_j) = G(x_j-x_i) \tag{C.6b}$$

voraus. Damit gilt

$$\left\langle A(x_1,\dots,x_{2N};y_1,\dots,y_M;[s])\right\rangle_G = \tag{C.7}$$
$$= \frac{(-1)^N}{2^{2N+M}}\sum_{\epsilon_1=\pm1}\cdots\sum_{\epsilon_{2N+M}=\pm1}\epsilon_1\cdots\epsilon_N\prod_{m,m=1}^{2N+M} e^{-\frac{1}{2}\beta^2\epsilon_m G(x_m-x_m)\epsilon_m}$$

Ist $\epsilon^2=1$, so gilt für alle x

$$e^{-\epsilon x} = \cosh x - \epsilon\sinh x \tag{C.8}$$

Einsetzen von (C.8) in (C.7) liefert unter Verwendung der Abkürzungen

$$V := e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G(0)} \tag{C.9}$$

$$S_{nm} := -\sinh \beta^2 G(x_n - x_m) \tag{C.10}$$

$$C_{nm} := \cosh \beta^2 G(x_n - x_m) \tag{C.11}$$

$$\langle A(x_1, \dots, x_{2N}; y_1, \dots, y_M); [S] \rangle_G =$$

$$= (-1)^N \left(\frac{V}{2}\right)^{2N+M} \sum_{\epsilon_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\epsilon_{2N+M} = \pm 1} \epsilon_1 \cdots \epsilon_{2N} \prod_{\substack{n,m=1 \\ n<m}}^{2N+M} \left(C_{nm} + \epsilon_n \epsilon_m S_{nm} \right) \tag{C.12}$$

Nun wird das Produkt auf der rechten Seite von (C.12) ausmultipliziert. Jeder Term der dabei auftretenden Summe läßt sich durch einen Graphen mit $2N+M$ (nummerierten) Ecken repräsentieren. Jede Ecke ist mit jeder anderen Ecke durch genau eine Kante verbunden. Dabei sind zwei Typen von Kanten möglich, entsprechend den beiden möglichen Faktoren C_{nm} bzw. $\epsilon_n \epsilon_m S_{nm}$ in (C.12).

Man betrachte nun eine beliebige, nichtleere Teilmenge $\{i, \dots, k\}$ der ersten $2N+M$ natürlichen Zahlen $\{1, 2, \dots, 2N+M\}$. Dann gilt offensichtlich

$$\sum_{\epsilon_i = \pm 1} \cdots \sum_{\epsilon_{2N+M} = \pm 1} \epsilon_i \cdots \epsilon_k = 0 \tag{C.13}$$

Es liefern somit nur diejenigen Terme aus dem Produkt

$$\prod_{\substack{n,m=1 \\ n<m}}^{2N+M} \left(C_{nm} + \epsilon_n \epsilon_m S_{nm} \right)$$

einen von Null verschiedenen Beitrag zur rechten Seite von (C.12), deren ϵ - Faktoren sich genau zu dem Produkt

$$\epsilon_1 \cdots \epsilon_{2N}$$

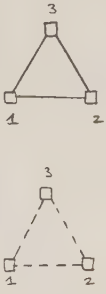
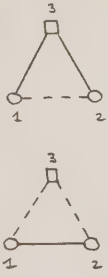
zusammenfinden. Für die zugehörigen Graphen bedeutet dies folgende Einschränkung: Von jeder der $2N$ ersten Ecken (die den Faktoren $\sinh \beta s(x_1) \cdots \sinh \beta s(x_{2N})$ in (C.1) zugeordnet sind) muß eine ungerade Anzahl von Kanten des zweiten Typs (entsprechend Faktoren $\epsilon_n \epsilon_m S_{nm}$ in (C.12)) ausgehen, von jeder der M letzten Ecken (die den Faktoren $\cosh \beta s(y_1) \cdots \cosh \beta s(y_M)$ zugeordnet sind) muß eine gerade Anzahl von Kanten des zweiten Typs ausgehen.

Die folgende Tabelle verdeutlicht diese Prozedur an einigen Beispielen. Dabei werden folgende Symbole zur Kennzeichnung der Ecken verwendet:

$$\sin\beta\, s(x_i) \quad \longleftrightarrow \quad \circ\ i$$
$$\cos\beta\, s(x_j) \quad \longleftrightarrow \quad \square\ j \qquad \text{(C.14)}$$

Für die Kanten verwende ich die Symbole

$$S_{ij} = -\sinh\beta^2 G(x_i - x_j) \quad \longleftrightarrow \quad i \text{ - - - } j \qquad \text{(C.15)}$$
$$C_{ij} = \cosh\beta^2 G(x_i - x_j) \quad \longleftrightarrow \quad i \text{ ——— } j$$

N	M		$\langle A(x_1 \dots x_{2N}; y_1 \dots y_M; [s]) \rangle_G$
0	1		$\exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 G(0)\right)$
0	2		$\exp\left(-\beta^2 G(0)\right) \cosh\left[\beta^2 G(x_1-x_2)\right]$
1	0		$\exp\left(-\beta^2 G(0)\right) \sinh\left[\beta^2 G(x_1-x_2)\right]$
0	3		$\exp\left(-\frac{3}{2}\beta^2 G(0)\right) \cdot$ $\cdot \Big\{ \cosh\left[\beta^2 G(x_1-x_2)\right] \cosh\left[\beta^2 G(x_2-x_3)\right] \cosh\left[\beta^2 G(x_3-x_1)\right]$ $- \sinh\left[\beta^2 G(x_1-x_2)\right] \sinh\left[\beta^2 G(x_2-x_3)\right] \sinh\left[\beta^2 G(x_3-x_1)\right] \Big\}$
1	1		$\exp\left(-\frac{3}{2}\beta^2 G(0)\right) \cdot$ $\cdot \Big\{ \sinh\left[\beta^2 G(x_1-x_2)\right] \cosh\left[\beta^2 G(x_2-x_3)\right] \cosh\left[\beta^2 G(x_3-x_1)\right]$ $- \cosh\left[\beta^2 G(x_1-x_2)\right] \sinh\left[\beta^2 G(x_2-x_3)\right] \sinh\left[\beta^2 G(x_3-x_1)\right] \Big\}$

D. Störungsrechnung: Statik

Ausgangspunkt der Störungsrechnung ist die Beziehung (A.3)

$$\Gamma[M] = \tfrac{1}{2}(M, G^{-1} M) + \mathcal{P}[M] \qquad (D.1)$$

Man entwickle nun $\mathcal{P}[M]$ bezüglich der Wechselwirkung $V[s]$ gemäß

$$\mathcal{P}[M] = \sum_n \mathcal{P}_n[M] \qquad (D.2)$$

Dabei ist $\mathcal{P}_n[M]$ der Term n-ter Ordnung in einer systematischen Entwicklung nach Potenzen der Kopplungskonstanten. Zur Bestimmung von $\mathcal{P}_n[M]$ entwickle man zunächst die rechte Seite der Zustandsgleichung (A.23) nach der Kopplungskonstanten. Einsetzen dieser Entwicklung in (A.29) und (A.33) und systematische Entwicklung der entstehenden Terme liefert dann durch Koeffizientenvergleich mit (D.2) die gewünschten Größen $\mathcal{P}_n[M]$. Die ersten drei Terme lauten

$$\mathcal{P}_1[M] = \langle V[s+M] \rangle_G \qquad (D.3)$$

$$\mathcal{P}_2[M] = -\frac{1}{2!}\left(\langle V^2[s+M] \rangle_G - \langle V[s+M] \rangle_G^2 \right) \qquad (D.4)$$

$$+ \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_1)} \right\rangle_G G(x_1, x_2) \left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_2)} \right\rangle_G$$

$$\mathcal{P}_3[M] = \frac{1}{3!}\Big(\langle V^3[s+M] \rangle_G - 3 \langle V^2[s+M] \rangle_G \langle V[s+M] \rangle_G + 2 \langle V[s+M] \rangle_G^3 \Big) \qquad (D.5)$$

$$- \int dx_1 dx_2 \left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_1)} \right\rangle_G G(x_1, x_2) \cdot$$

$$\cdot \left(\left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_2)} V[s+M] \right\rangle_G - \left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_2)} \right\rangle_G \langle V[s+M] \rangle_G \right)$$

$$+ \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 \left\{ \left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_1)} \right\rangle_G G(x_1,x_2) \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \left\langle \frac{\delta^2 V[s+M]}{\delta s(x_2)\delta s(x_3)} \right\rangle_G G(x_3,x_4) \left\langle \frac{\delta V[s+M]}{\delta s(x_4)} \right\rangle_G \right\}$$

An dieser Stelle sei die Bemerkung angebracht, daß die Beziehungen (D.3) bis (D.5) nicht nur für das sine-Gordon Modell gelten, sondern weit allgemeiner sind.

Im sine-Gordon Modell ist [10]

$$V[s] = -\frac{\alpha}{a^2\beta^2} \int dx \cos \beta s(x) \tag{D.6}$$

$$\frac{\delta V[s]}{\delta s(x_1)} = \frac{\alpha}{a^2\beta} \sin \beta s(x) \tag{D.7}$$

$$\frac{\delta^2 V[s]}{\delta s(x_1)\delta s(x_2)} = \frac{\alpha}{a^2} \delta(x_1-x_2) \cos \beta s(x_1) \tag{D.8}$$

Man sieht, daß die obige Darstellung der Störungsreihe (D.3) bis (D.5) für das sine-Gordon Modell besonders zweckmäßig ist. Alle dort auftretenden gaussischen Erwartungswerte können leicht mit der in Anhang C ausführlich dargestellten graphischen Methode berechnet werden. Man erhält sofort

$$P_1[M] = -\frac{\alpha}{a^2\beta^2} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G(0)} \int dx \cos \beta M(x) \tag{D.9}$$

$$P_2[M] = -\frac{1}{2!}\left(\frac{\alpha}{a^2\beta^2}\right)^2 e^{-\beta^2 G(0)} \int dx_1\, dx_2 \cdot$$

$$\cdot \Big\{ \cos\beta M(x_1)\cos\beta M(x_2)\left[\cosh\beta^2 G(x_1-x_2) - 1\right] \qquad \text{(D.10)}$$

$$+ \sin\beta M(x_1)\sin\beta M(x_2)\left[\sinh\beta^2 G(x_1-x_2) - \beta^2 G(x_1-x_2)\right]\Big\}$$

$$P_3[M] = -\frac{1}{3!}\left(\frac{\alpha}{a^2\beta^2}\right)^3 e^{-\frac{3}{2}\beta^2 G(0)} \int dx_1 dx_2 dx_3 \cdot \qquad \text{(D.11)}$$

$$\cdot \Big\{ \cos\beta M(x_1)\cos\beta M(x_2)\cos\beta M(x_3) \cdot$$

$$\cdot \Big[\left(\cosh\beta^2 G(x_1-x_2)-1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_2-x_3)-1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_3-x_1)-1\right)$$
$$+ \left(\cosh\beta^2 G(x_2-x_3)-1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_3-x_1)-1\right)$$
$$+ 2\cdot\left(\cosh\beta^2 G(x_1-x_2)-1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_2-x_3)-1\right)$$
$$- \sinh\beta^2 G(x_1-x_2)\sinh\beta^2 G(x_2-x_3)\sinh\beta^2 G(x_3-x_1)\Big]$$

$$+ 3\sin\beta M(x_1)\sin\beta M(x_2)\cos\beta M(x_3) \cdot$$

$$\cdot \Big[\sinh\beta^2 G(x_1-x_2)\left(\cosh\beta^2 G(x_2-x_3)-1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_3-x_1)-1\right)$$
$$+ 2\left(\sinh\beta^2 G(x_1-x_2)-\beta^2 G(x_1-x_2)\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_3-x_1)-1\right)$$
$$- \sinh\beta^2 G(x_1-x_3)\sinh\beta^2 G(x_3-x_2)\left(\cosh\beta^2 G(x_2-x_1)-1\right)$$
$$- \left(\sinh\beta^2 G(x_1-x_2)-\beta^2 G(x_1-x_2)\right)\left(\sinh\beta^2 G(x_2-x_3)-\beta^2 G(x_2-x_3)\right)\Big]\Big\}$$

Daraus ergibt sich für die Zweipunkt-Vertexfunktion

$$\Gamma^{(2)}(x,y) := \frac{\delta^2 \Gamma[M]}{\delta M(x)\,\delta M(y)}\Big|_{M=0}$$

$$= G^{-1}(x-y) + \sum_n \frac{\delta^2 P_n[M]}{\delta M(x)\,\delta M(y)}\Big|_{M=0} \qquad (D.12)$$

das Resultat (vergleiche [10])

$$\frac{\delta^2 P_1[M]}{\delta M(x)\delta M(y)}\Big|_{M=0} = \frac{\alpha}{a^2}\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G(0)}\, \delta(x-y) \qquad (D.13)$$

$$\frac{\delta^2 P_2[M]}{\delta M(x)\delta M(y)}\Big|_{M=0} = \left(\frac{\alpha}{a^2\beta}\right)^2 e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G(0)} \cdot \qquad (D.14)$$

$$\cdot \Big\{ \delta(x-y) \int dx_1 \left[\cosh\beta^2 G(x) - 1\right] - \left[\sinh\beta^2 G(x-y) - \beta^2 G(x-y)\right] \Big\}$$

$$\frac{\delta^2 P_3[M]}{\delta M(x)\,\delta M(y)}\Big|_{M=0} = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\alpha}{a^2\beta}\right)^3 e^{-\frac{3}{2}\beta^2 G(0)} \cdot$$

$$\cdot \Big\{ \frac{1}{2}\delta(x-y) \int dx_1 dx_2 \cdot$$

$$\cdot \Big[\left(\cosh\beta^2 G(x_1) - 1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_2) - 1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_1-x_2) - 1\right) \qquad (D.15)$$

$$+ \left(\cosh\beta^2 G(x_1) - 1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_2) - 1\right)$$

$$+ 2\left(\cosh\beta^2 G(x_1) - 1\right)\left(\cosh\beta^2 G(x_1-x_2) - 1\right)$$

$$- \sinh\beta^2 G(x_1)\sinh\beta^2 G(x_2)\sinh\beta^2 G(x_1-x_2) \Big]$$

$$
\begin{aligned}
&+ \int dx_1 \cdot \\
&\cdot \Big[\Big(\sinh\beta^2 G(x_1-x) - \beta^2 G(x_1-x) \Big) \Big(\sinh\beta^2 G(x_1-y) - \beta^2 G(x_1-y) \Big) \\
&\quad + \Big(\cosh\beta^2 G(x-y) - 1 \Big) \sinh\beta^2 G(x_1-x) \sinh\beta^2 G(x_1-y) \\
&\quad - 2 \Big(\sinh\beta^2 G(x-y) - \beta^2 G(x-y) \Big) \Big(\cosh\beta^2 G(x_1) - 1 \Big) \\
&\quad - \sinh\beta^2 G(x-y) \Big(\cosh\beta^2 G(x_1-x) - 1 \Big) \Big(\cosh\beta^2 G(x_1-y) - 1 \Big) \Big] \Big\}
\end{aligned}
$$

Die Gleichung (3.1) ergibt sich unter Verwendung der Abkürzungen (3.2) aus den Gleichungen (D.12) bis (D.15) durch Fouriertransformation

$$
\Gamma^{(2)}(x,y) \equiv \Gamma^{(2)}(x-y) - \sum_q e^{iq(x-y)} \Gamma^{(2)}_q \qquad \text{(D.16)}
$$

E. Störungsrechnung: Dynamik

Die Störungsrechnung des dynamischen Modells verläuft analog. Setzt man

$$\underline{M} := (M_1, M_2) \equiv (\tilde{M}, M) \tag{E.1}$$

$$\underline{S} := (S_1, S_2) \equiv (\tilde{S}, S) \tag{E.2}$$

$$G_{ij}(xt, x't') := \langle S_i(xt) S_j(x't') \rangle_G \; ; \; \underline{\underline{G}} = (G_{ij}) \tag{E.3}$$

so ist

$$\begin{aligned} \Gamma[\underline{M}] &= \tfrac{1}{2} \left(\underline{M}, \underline{\underline{G}}^{-1} \underline{M} \right) + P[\underline{M}] \\ &= \tfrac{1}{2} \sum_{ij=1}^{2} \int dx_1 dt_1 dx_2 dt_2 \cdot \\ &\quad \cdot \left\{ M_i(x_1 t_1) G^{-1}_{ij}(x_1 t_1, x_2 t_2) M_j(x_2 t_2) \right\} + P[\underline{M}] \end{aligned} \tag{E.4}$$

Für die ersten Glieder der Entwicklung

$$P[\underline{M}] = \sum_n P_n[\underline{M}] \tag{E.5}$$

erhält man

$$P_1[\underline{M}] = \langle V[\underline{S} + \underline{M}] \rangle_G \tag{E.6}$$

$$P_2[\underline{M}] = -\frac{1}{2!} \left(\langle V^2[\underline{S} + \underline{M}] \rangle_G - \langle V[\underline{S} + \underline{M}] \rangle_G^2 \right)$$

$$+ \frac{1}{2!} \sum_{ij=1}^{2} \int dx_1 dt_1 dx_2 dt_2 \cdot \tag{E.7}$$

$$\cdot \left\langle \frac{\delta V[\underline{S} + \underline{M}]}{\delta S_i(x_1 t_1)} \right\rangle_G G_{ij}(x_1 t_1, x_2 t_2) \left\langle \frac{\delta V[\underline{S} + \underline{M}]}{\delta S_j(x_2 t_2)} \right\rangle_G$$

$$P_3[\underline{M}] = \frac{1}{3!}\Big(\langle V^3[\underline{s}+\underline{M}]\rangle_G - 3\langle V^2[\underline{s}+\underline{M}]\rangle_G \langle V[\underline{s}+\underline{M}]\rangle_G + 2\langle V[\underline{s}+\underline{M}]\rangle_G^3\Big)$$

$$-\sum_{i_1,i_2=1}^{2}\int dx_1 dt_1\, dx_2 dt_2 \left\langle \frac{\delta V[\underline{s}+\underline{M}]}{\delta s_{i_1}(x_1 t_1)}\right\rangle_G G_{i_1 i_2}(x_1 t_1, x_2 t_2)\cdot$$

$$\cdot\left(\left\langle \frac{\delta V[\underline{s}+\underline{M}]}{\delta s_{i_2}(x_2 t_2)} V[\underline{s}+\underline{M}]\right\rangle_G - \left\langle \frac{\delta V[\underline{s}+\underline{M}]}{\delta s_{i_2}(x_2 t_2)}\right\rangle_G \langle V[\underline{s}+\underline{M}]\rangle_G\right) \qquad \text{(E.8)}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{i_1=1}^{2}\cdots\sum_{i_4=1}^{2}\int dx_1 dt_1 \cdots dx_4 dt_4 \left\{\left\langle \frac{\delta V[\underline{s}+\underline{M}]}{\delta s_{i_1}(x_1 t_1)}\right\rangle_G G_{i_1 i_2}(x_1 t_1, x_2 t_2)\cdot\right.$$

$$\left.\cdot\left\langle \frac{\delta^2 V[\underline{s}+\underline{M}]}{\delta s_{i_2}(x_2 t_2)\,\delta s_{i_3}(x_3 t_3)}\right\rangle_G G_{i_3 i_4}(x_3 t_3, x_4 t_4)\left\langle \frac{\delta V[\underline{s}+\underline{M}]}{\delta s_{i_4}(x_4 t_4)}\right\rangle_G\right\}$$

In dem dynamischen sine-Gordon Modell von Chui und Weeks ist

$$V[\underline{s}] = \frac{\alpha\gamma}{a^2\beta}\int dx\, dt\ \tilde{s}(xt)\sin\beta s(xt) \qquad \text{(E.9)}$$

$$\frac{\delta V[\underline{s}]}{\delta \underline{s}(xt)} = \frac{\alpha\gamma}{a^2\beta}\Big(\sin\beta s(xt)\,,\ \beta\tilde{s}(xt)\cos\beta s(xt)\Big) \qquad \text{(E.10)}$$

$$\frac{\delta^2 V[\underline{s}]}{\delta \underline{s}(x_1 t_1)\,\delta \underline{s}(x_2 t_2)} = \frac{\alpha\gamma}{a^2}\begin{pmatrix} 0 & ; & \cos\beta s(x_1 t_1) \\ \cos\beta s(x_1 t_1) & ; & -\beta\tilde{s}(x_1 t_1)\sin\beta s(x_1 t_1)\end{pmatrix}\delta(x_1 - x_2)\,\delta(t_1 - t_2) \qquad \text{(E.11)}$$

Wie man durch Einsetzen von (E.9) bis (E.11) in (E.6) bis (E.8) erkennt, treten zusätzlich zu den Termen, die bereits in Zusammenhang mit dem statischen Modell in Anhang D diskutiert wurden, zusammengesetzte Operatoren der Form

$$\tilde{s}(x_1 t_1) \cdots \tilde{s}(x_n t_n)\, A[s]$$

auf, wobei $A[s]$ von der Form (C.1) ist. Für deren Erwartungswerte bezüglich einer Gaussverteilung gilt

$$\langle \tilde{s}(x_1 t_1) \cdots \tilde{s}(x_m t_m)\, A[s] \rangle_G =$$

$$= \int dx_1' dt_1' \cdots dx_m' dt_m' \, \langle \tilde{s}(x_1 t_1)\, s(x_1' t_1') \rangle_G \cdot \ldots \tag{E.12}$$

$$\ldots \cdot \langle \tilde{s}(x_m t_m)\, s(x_m' t_m') \rangle_G \left\langle \frac{\delta^m A[s]}{\delta s(x_1' t_1') \cdots \delta s(x_m' t_m')} \right\rangle_G$$

Der Beweis dieser Relation folgt unmittelbar aus der zu (A.9) analogen Relation

$$\langle F[\underline{s}]\, e^{(\underline{h},\underline{s})} \rangle_G = \langle F[\underline{s} + \underline{\underline{G}}\,\underline{h}] \rangle_G \, \langle e^{(\underline{h},\underline{s})} \rangle_G \tag{E.13}$$

durch Differentiation nach $\tilde{h}$ an der Stelle $\underline{h} = (\tilde{h}, h) = 0$. Dabei ist $F[s]$ durch $A[s]$ zu ersetzen. Ferner ist zu beachten, daß auf Grund der Kausalität [25] die Erwartungswerte

$$\langle \tilde{s}(x_1 t_1) \cdots \tilde{s}(x_n t_m) \rangle_G = 0 \tag{E.14}$$

verschwinden.

Die Differentiation der Operatoren $A[s]$ nach S führt wieder auf zusammengesetzte Operatoren vom Typ (C.1), so daß die Erwartungswerte auf der rechten Seite von (E.12) nunmehr mit Hilfe der im Anhang C beschriebenen Methode sofort angegeben werden können.

Das Ergebnis für die ersten beiden Ordnungen der Störungsrechnung ist

$$P_1[\underline{M}] = \frac{\alpha \chi}{a^2 \beta}\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G_{22}(00)} \int dx\, dt\, \tilde{M}(xt) \sin \beta M(xt) \tag{E.15}$$

$$P_2[\underline{M}] = \left(\frac{\alpha\gamma}{a^2\beta}\right)^2 e^{-\beta^2 G_{22}(00)} \int dx_1 dt_1 dx_2 dt_2 \; \tilde{M}(x_2 t_2) \cdot$$

$$\cdot \Big\{ \beta G_{12}(x_1-x_2, t_1-t_2) \cdot$$

$$\cdot \Big[\cos\beta M(x_1 t_1) \sin\beta M(x_2 t_2) \, S(x_1-x_2, t_1-t_2)$$

$$- \sin\beta M(x_1 t_1) \cos\beta M(x_2 t_2) \, P(x_1-x_2, t_1-t_2) \Big] \qquad \text{(E.16)}$$

$$- \tfrac{1}{2} \tilde{M}(x_1 t_1) \cdot$$

$$\Big[\sin\beta M(x_1 t_1) \sin\beta M(x_2 t_2) \, P(x_1-x_2, t_1-t_2)$$

$$+ \cos\beta M(x_1 t_1) \cos\beta M(x_2 t_2) \, Q(x_1-x_2, t_1-t_2) \Big] \Big\}$$

Dabei wurden die Abkürzungen verwendet (vergleiche (3.2))

$$I(xt) = \beta^2 G_{22}(xt) \qquad \text{(E.17)}$$

$$C(xt) = \cosh I(xt) \; ; \; S(xt) = \sinh I(xt) \qquad \text{(E.18)}$$

$$P(xt) = C(xt) - 1 \; ; \; Q(xt) = S(xt) - I(xt) \qquad \text{(E.19)}$$

Aufgrund der Symmetrie (4.8) liefert der Term dritter Ordnung keinenBeitrag zur intrinsisch dynamischen Renormierungskonstante $\mathfrak{Z}$. Für die Zweipunktfunktion

$$\Gamma^{12}_{q\omega} = -i\omega + \gamma(q^2+\omega^2) \qquad \text{(E.20)}$$

$$+ \int dx\, dt \; e^{-i(qx-\omega t)} \; \frac{\delta^2 P[\underline{M}]}{\delta \tilde{M}(xt) \, \delta M(00)} \Big|_{\underline{M}=0}$$

erhält man in zweiter Ordnung Störungsrechnung aus (E.15),(E.16)

$$\Gamma^{12}_{q\omega} = -i\omega + \gamma(q^2+\omega^2) + \frac{\alpha\gamma}{a^2} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G_{22}(00)} \qquad \text{(E.21)}$$

$$+ \left(\frac{\alpha\gamma}{a^2}\right)^2 e^{-\beta^2 G_{12}(00)} \int dx\, dt \cdot$$

$$\cdot \Big\{ G_{12}(xt) \, S(xt) - e^{-i(qx-\omega t)} G_{21}(xt) P(xt) \Big\}$$

Anwendung des Fluktuations-Dissipations-Theorems [25] in der Form

$$G_{12}(xt) = \frac{1}{\gamma} \theta(-t)\, \partial_t\, G_{22}(xt) \tag{E.22}$$

$$G_{21}(xt) = -\frac{1}{\gamma} \theta(t)\, \partial_t\, G_{22}(xt) \tag{E.23}$$

liefert mit (E.17) - (E.19)

$$S(xt)\, G_{12}(xt) = \frac{1}{\gamma\beta^2}\, \theta(-t)\, \partial_t\, P(xt) \tag{E.24}$$

$$P(xt)\, G_{21}(xt) = -\frac{1}{\gamma\beta^2}\, \theta(t)\, \partial_t\, Q(xt) \tag{E.25}$$

Einsetzen in (E.21) ergibt nach partieller Integration

$$\Gamma^{12}_{q\omega} = -i\omega + \gamma(q^2+\omega^2) + \gamma\frac{\alpha}{a^2}\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 G_{22}(00)} + \gamma\left(\frac{\alpha}{a^2\beta}\right)^2 e^{-\beta^2 G_{22}(00)} \int dx \cdot \left\{ \left[P(x0) - e^{-iqx}\, Q(x0) \right] - i\omega \int_0^\infty dt\, e^{-i(qx-\omega t)}\, Q(xt) \right\} \tag{E.26}$$

In (E.26) erkennt man deutlich die Zerlegung in statische ($\omega=0$) und intrinsisch dynamische ($\sim\omega$) Anteile.

Die Bestimmung von $\tilde{Z}$ erfolgt aus (E.26) mit Hilfe der Renormierungsbedingung (5.29c) und liefert für $na \ll 1$ das Resultat (4.9), (4.10)

$$\tilde{Z} = 1 + \frac{b}{64}\, \alpha^2 \ln n^2 a^2 + O(\alpha^4) \tag{E.27}$$

mit

$$b = \int_0^\infty ds\, \frac{1}{s^2}\, e^{-2\int_s^\infty dx\, \frac{1}{x}\, e^{-x}} \tag{E.28}$$

Abbildungen

Abbildung 1

Renormierungsgruppentrajektorien für das statische sine-Gordon Modell in $d=2-\epsilon$ Dimensionen: $\epsilon > 0$

Abbildung 2

Renormierungsgruppentrajektorien für das statische sine-Gordon Modell in d=2 Dimensionen

Abbildung 3

Renormierungsgruppentrajektorien für das statische sine-Gordon Modell in $d=2-\epsilon$ Dimensionen: $\epsilon < 0$

Abbildung 4

Mittlere Wachstumsrate als Funktion der Differenz im chemischen Potential oberhalb der Roughening-Temperatur

Abbildung 5

Mittlere Wachstumsrate als Funktion der Differenz im chemischen Potential unterhalb der Roughening-Temperatur

Abbildung 6

Typische Resultate einer Monte-Carlo Simulation für die mittlere Wachstumsrate

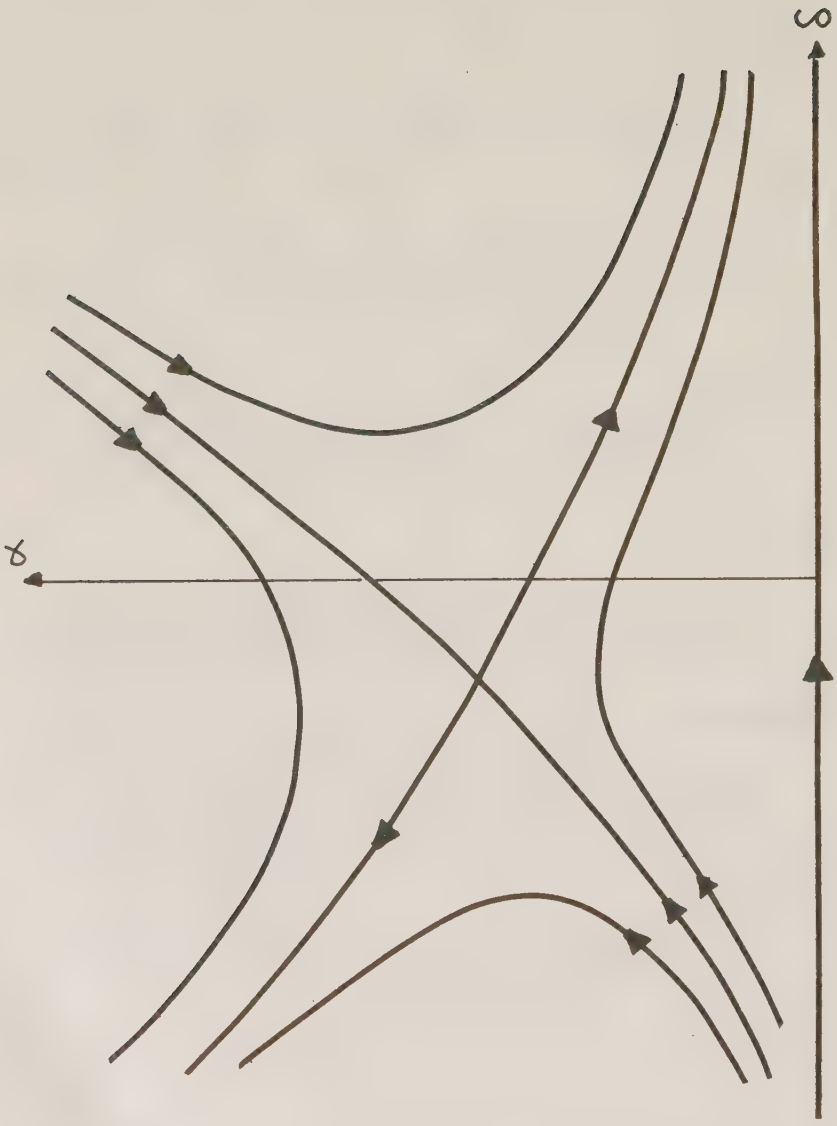


Abb.1

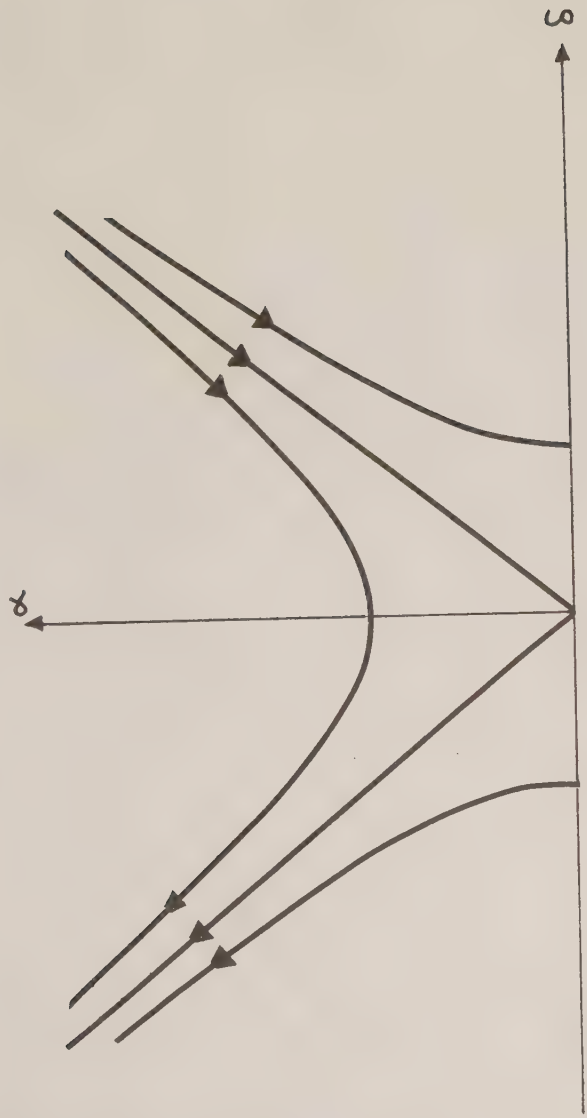


Abb. 2

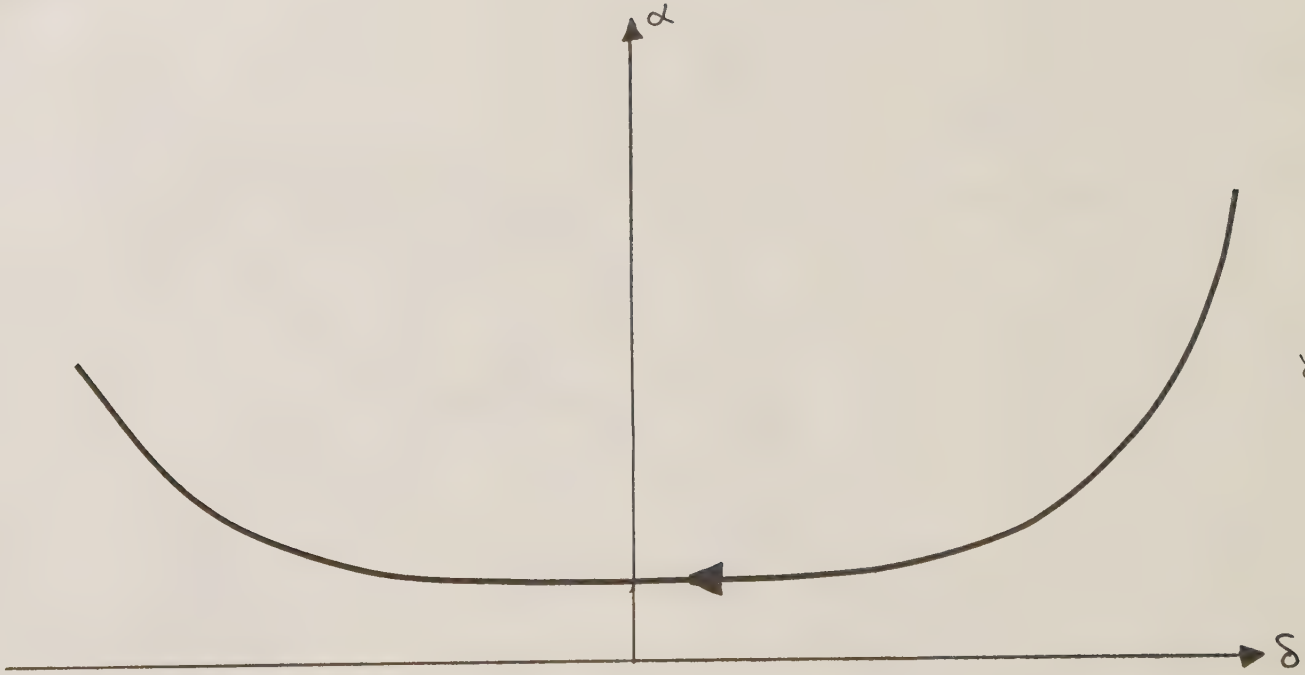


Abb. 3

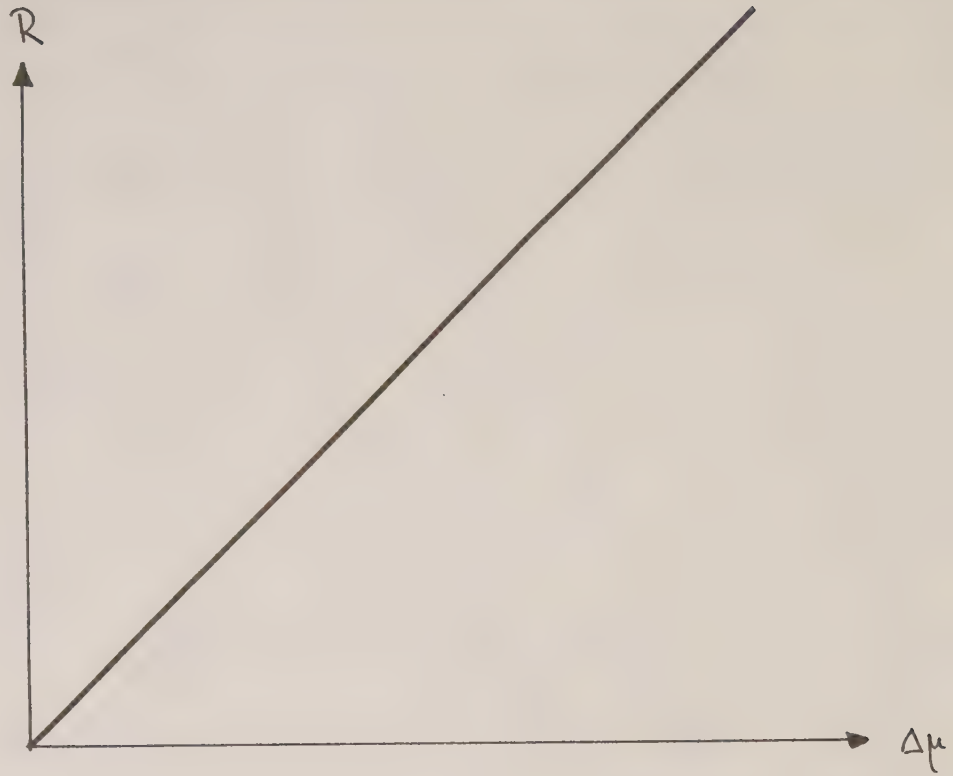


Abb.4

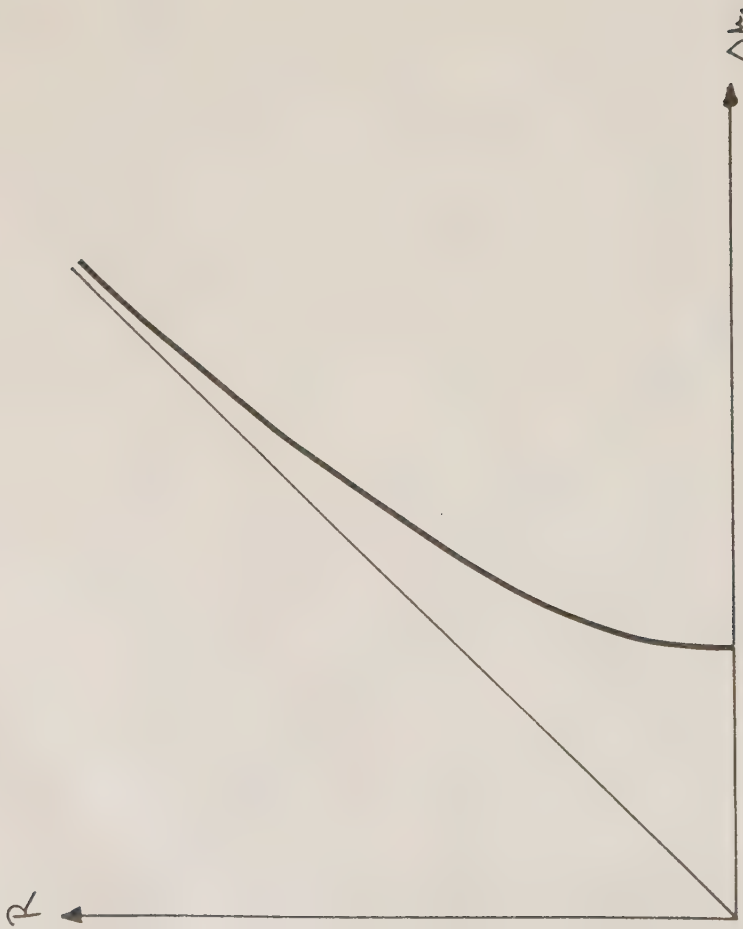


Abb. 5

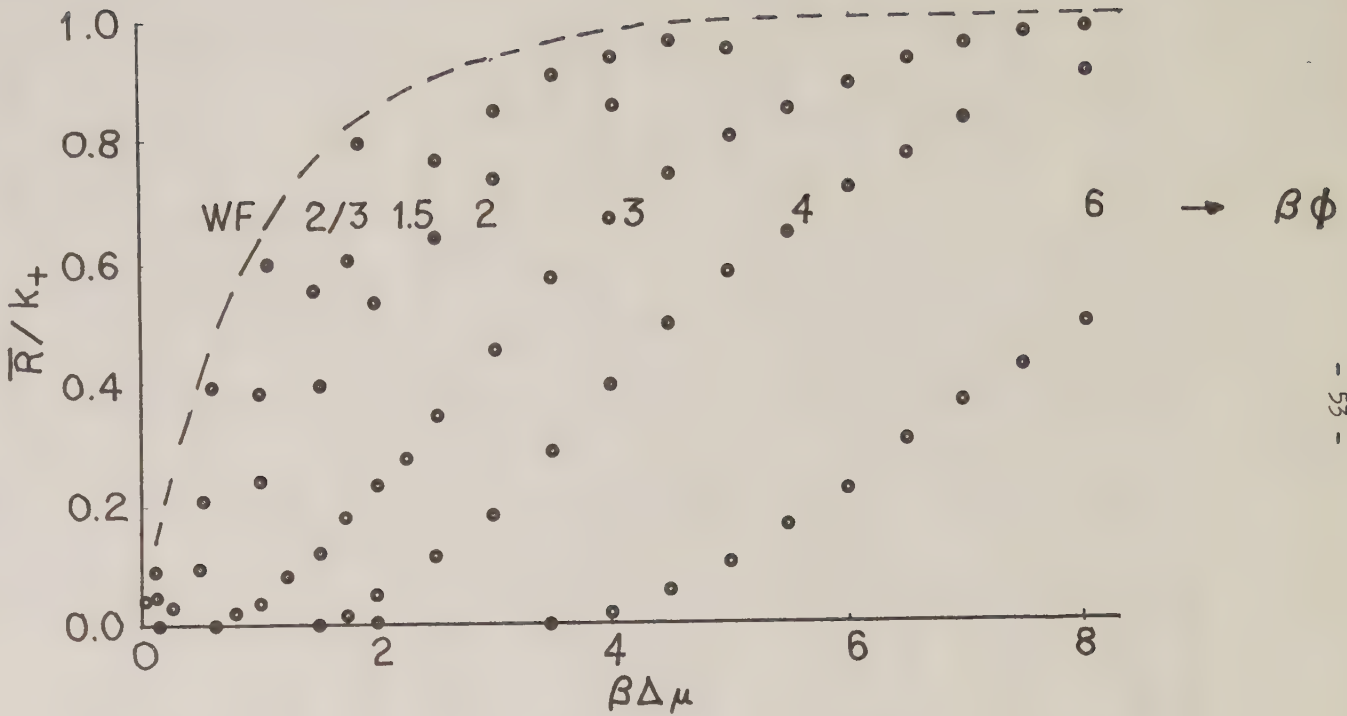

1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
$\overline{R}/k_+$
WF / 2/3 1.5 2 3 4 6 → $\beta\phi$
0
2
4
6
8
$\beta\Delta\mu$

Abb. 6

Literaturverzeichnis

1. Coleman, S.: Phys. Rev. D 11, 2088 (1975)
2. Chui, S.T., Weeks, J.D.: Phys. Rev. Lett. 40, 733 (1978)
3. Samuel, S.: Phys. Rev. D 18, 1916 (1978)
4. Kosterlitz, M.: J. Phys. C 7, 1046 (1973)
   Kosterlitz, M., Thouless, D.J.: J. Phys. C 6, 1181 (1973)
5. Landau, J., Lipson, S.G., Määttänen, L.M., Balfour, L.S., Edwards, D.O.: Phys. Rev. Lett. 45, 31 (1980)
6. Müller-Krumbhaar, H. (private Mitteilung)
7. Saito, Y., Müller-Krumbhaar, H.: Phys. Rev. B 23, 308 (1981)
8. Neudecker, B. (to be published)
9. Halperin, B., Hohenberg, P.C.: Rev. Mod. Phys. 49, 435 (1977)
10. Amit, D.J., Goldschmidt, Y.Y., Grinstein, G.: J. Phys. A 13, 585 (1980)
11. Neudecker, B.: Z. Phys. B 48, 149 (1982)
12. Minnhagen, P., Rosengren, A., Grinstein, G.: Phys. Rev. B 18, 1356 (1978)
13. Nelson, D.R., Kosterlitz, J.M.: Phys. Rev. Lett. 39, 1201 (1977
14. Banks, T., Horn, D., Neuberger, H.: Nucl. Phys. B 108, 119 (1976)
15. Schroer, B., Truong, T.: Phys. Rev. D 15, 1684 (1977)
16. Wiegmann, P.B.: J. Phys. C 11, 1583 (1978)
17. Die Anregung zu diesem Kapitel verdanke ich Herrn Prof. Dr. F. Wegner, Heidelberg
18. Abramowitz, M., Stegun, I.A.: Handbook of Mathematical Functions, Dover Publ., Inc., New York 1965
19. Kosterlitz, M.: J. Phys. C 10, 3753 (1977)
20. Nelson, D.R.: Phys. Rev. B 11, 3504 (1975)
21. Amit, D.J.: Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena, Mc Graw-Hill, London 1978
22. Janssen, H.K.: Z. Phys. B 23, 377 (1976)
23. De Dominicis, C.: J. Phys. (Paris) C 1, 247 (1976)
24. Martin, P.C., Siggia, E.D., Rose, H.A.: Phys. Rev. A 8, 423 (1973)
25. Bausch, R., Jannsen, H.K., Wagner, H.: Z. Phys. B 24, 113 (1976)

26. Saito, Y.: Z. Phys. B 32, 75 (1978)
27. Beijeren, H. van: Phys. Rev. Lett. 38, 993 (1977)
28. Siehe z. B. in Huang, K.: Statistical Mechanics, Wiley, New York 1963, S. 239
29. Weeks, J.D., Gilmer, G.H. (to be published)
30. Temkin, D.E. in: Crystallization Prozesses (Consultant Bureau, New York 1966)
31. Wilson, H.A.: Philos. Mag. 50, 238 (1900)
Frenkel, J.: Phys. Z. Sowjetunion 1, 498 (1932)
32. Becker, R., Doering, W.: Ann. Physik 24, 719 (1935)
33. José, J.V., Kadanoff, L.P., Kirkpatrick, S., Nelson, D.R.: Phys. Rev. B 16, 1217 (1977)
34. Bausch, R., Janssen, H.K.: Z. Phys. B 25, 275 (1976)
35. Nelson, D.R. (to be published)
36. Brézin, E., Le Guillou, J.C., Zinn-Justin, J. in: Phase Transitions and Critical Phenomena, ed. C. Domb, M.S. Green, Vol. 6, Academic Press 1976
37. Wegner, F. in (siehe 36)
38. Becker, R.: Theorie der Wärme, Springer, Heidelberg 1955
39. Wilson, K.G.: Phys. Rev. D 2, 1473 (1970)

Herrn Professor Dr. R. Bausch gilt mein besonderer Dank für die Anregung zu und all die Unterstützung während dieser Arbeit. Diskussionen mit Professor Dr. H.K. Janssen, Professor Dr. H. Leschke und Dr. N. Breuer seien an dieser Stelle dankbar erwähnt. Ebenso danke ich Herrn Professor Dr. F. Wegner, Heidelberg, Herrn Professor Dr. D. Amit, Jerusalem und Herrn Professor Dr. H. Müller-Krumbhaar, Jülich, für interessante Anregungen und wertvolle Hinweise.

Vor allem danke ich meiner lieben Frau für all das Verständnis, das sie meiner Arbeit entgegenbrachte, und für die sorgfältige Anfertigung des Manuskriptes.

Lebenslauf

30.5.1953	geboren in Bonn als drittes Kind des Studienrates Hans-Walter Neudecker und seiner Ehefrau Elisabeth, geb. Stuch
1959-1963	Besuch der Volksschule in Andernach und Irlich (Rheinland-Pfalz)
1963-1971	Besuch des Werner-Heisenberg-Gymnasiums in Neuwied (mathematisch-naturwissenschaftlicher Zweig)
1971	Abitur
1971-1974	Studium der Elektrotechnik an der RWTH Aachen
1971-1977	Stipendiat der Studienstiftung des deutschen Volkes
1972-1978	Studium der Physik an der RWTH Aachen
1973	Vordiplom Elektrotechnik und Physik
1974-1976	Studium des Lehramtes an berufsbildenden Schulen Elektrotechnik/Mathematik
1976	1. Staatsprüfung für das Lehramt an berufsbildenden Schulen
1978	Diplom in Physik. Thema der Diplomarbeit: Zum Problem einer selbstkonsistenten RPA-Näherung in der Vielelektronentheorie. Betreuer: Prof. Dr. H.D. Dietze
1978-1979	Verwalter der Stelle eines wissenschaftlichen Assistenten am Institut für Theoretische Physik der RWTH Aachen bei Prof. Dr. H.D. Dietze
seit 1979	Wiss. Assistent am Institut für Theoretische Physik der Universität Düsseldorf bei Prof. Dr. R. Bausch
1981	Heirat mit Barbara Lechtape-Grüter
16.11.1982	Geburt der Tochter Christa